

SÉRIE A, N° 1416

N° D'ORDRE :

2281

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

PAR

M. Jean-Louis DESTOUCHES

1^{re} THÈSE. — RECHERCHES SUR LES MÉCANIQUES ONDULATOIRES
ET LA SUPERQUANTIFICATION EN VUE D'UNE
MÉCANIQUE GÉNÉRALE.

2^e THÈSE. — PROPOSITIONS DONNÉES PAR LA FACULTÉ.

Soutenues le 1^{er} Juillet 1933 devant la Commission d'examen

MM. JEAN PERRIN..... *Président.*

LOUIS DE BROGLIE... }
MAURICE FRÉCHET... } *Examineurs.*

PARIS

MASSON ET C^{ie}, EDITEURS

LIBRAIRES DE L'ACADÉMIE DE MÉDECINE

120, BOULEVARD SAINT-GERMAIN

1933



Digitized by the Internet Archive
in 2026

SÉRIE A, N° 1416

N° D'ORDRE :

2281

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

PAR

M. Jean-Louis DESTOUCHES

1^{re} THÈSE. — RECHERCHES SUR LES MÉCANIQUES ONDULATOIRES
ET LA SUPERQUANTIFICATION EN VUE D'UNE
MÉCANIQUE GÉNÉRALE.

2^e THÈSE. — PROPOSITIONS DONNÉES PAR LA FACULTÉ.

Soutenues le **Juillet 1933 devant la Commission d'examen**

MM. JEAN PERRIN.....	<i>Président.</i>
LOUIS DE BROGLIE... }	<i>Examineurs.</i>
MAURICE FRÉCHET... }	

PARIS

MASSON ET C^{ie}, ÉDITEURS

LIBRAIRES DE L'ACADÉMIE DE MÉDECINE

420, BOULEVARD SAINT-GERMAIN

1933

FACULTÉ DES SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

MM.

Doyen..... G. MAURAIN, *Professeur*, Physique du globe.

Doyen honoraire.... M. MOLLIARD.

Profess. honoraires..	{	H. LE CHATELIER.	EMILE PICARD.
		H. LEBESGUE.	RÉMY PERRIER
		A. FERNBACH.	LÉON BRILLOUIN.
		A. LEDUC.	A. DEREIMS.

	{	E. GOURSAT.....	Analyse supérieure et algèbre supér.
		P. JANET.....	Electrotechnique générale.
		F. WALLERANT...	Minéralogie.
		P. PAINLEVÉ.....	Mécanique anal. et mécanique céleste
		M. CAULLERY.....	Zoologie (Evolution des êtres organisés)
		ÉMILE BOREL.....	Calcul des probabilités et phys. mathém.
		H. ABRAHAM.....	Physique.
		M. MOLLIARD.....	Physiologie végétale.
		E. CARTAN.....	Géométrie supérieure.
		GABRIEL BERTRAND	Chimie biologique.
		JEAN PERRIN.....	Chimie physique.
		L. LAPICQUE.....	Physiologie générale.
		M ^{me} P. CURIE.....	Physique générale et radioactivité.
		G. URBAIN.....	Chimie générale.
		L. MARCHIS.....	Aviation.
		E. VESSIOT.....	Théorie des fonct. et théorie des transf.
		A. COTTON.....	Physique générale.
		J. DRACH.....	Application de l'analyse à la géométrie.
		CHARLES FABRY...	Physique.
		R. LESPIEAU.....	Théories chimiques.
		P. PORTIER.....	Physiologie comparée.
		CHARLES PÉREZ...	Zoologie.
		E. BLAISE.....	Chimie organique.
		P.-A. DANGEARD..	Botanique.
		LÉON BERTRAND..	Géolog. structurale et géolog. appliquée.
		E. RABAUD.....	Biologie expérimentale.
		G. JULIA.....	Calcul différentiel et calcul intégral.
		PAUL MONTEL.....	Mécanique rationnelle.
		V. AUGER.....	Chimie appliquée.
		P. WINTREBERT..	Anatomie et histologie comparées.
		O. DUBOSCO.....	Biologie maritime.
		BERNARD BLOCH...	Physique théorique et phys. céleste.
		L. LUTAUD.....	Géogr. physique et géol. dynamique.
		HENRI VILLAT....	Mécanique des fluides et applications.
		CH. JACOB.....	Géologie.
		P. PASCAL.....	Chimie minérale.
		E. ESCLANGON....	Astronomie.
		H. BENARD.....	Mécanique expérimentale des fluides.
		C. MAUGUIN.....	Minéralogie.
		L. BLARINGHEM..	Botanique.
		A. GUILLIERMOND.	Botanique (P. C. N.).
		A. DENJOY.....	Mathématiques générales.
		A. DUFOUR.....	Physique (P. C. N.).
		H. BÉGHIN.....	Mécanique physique et expérimentale.
		De BROGLIE.....	Théories physiques.
		G. RIBAUD.....	Hautes températures.

E. PECHARD.....	Chimie (Ens. P.C.N.)	FOCH.....	Méc. exp. des fluides.
A. GUILLET.....	Physique.	PAUTHENIER.....	Physique (P. C. N.).
M. GUICHARD...	Chimie minérale.	VILLEY.....	Méc. phys. et expér.
A. MICHEL-LEVY	Pétrographie.	LABROUSTE.....	Physique du Globe.
H. MOUTON.....	Chimie physique.	FREUNDLER.....	Chimie (P. C. N.).
L. DUNOYER....	Optique appliquée.	PRENANT.....	Zoologie.
M. JAVILLIER..	Chimie biologique.	P. JOB.....	Chimie générale.
ROBERT-LEVY..	Zoologie.	CHRETIEN.....	Optique appliquée.
A. DEBIERNE ..	Radioactivité.	G. BOHN.....	Zoologie (P. C. N.).
E. DARMOIS....	Physique.	R. COMBES.....	Sc. Natur. (P. C. N.).
G. BRUHAT.....	Physique.	GARNIER.....	Mécan. Rationnelle.
F. PICARD.....	Zool. (Ev. êtres org.)	PERES.....	Mécan. des fluides.
L. JOLEAUD...	Paléontologie.	LAUGIER.....	Physiologie générale.
M. FRECHET....	Calcul des probab.	TOUSSAINT.....	Techn. aéronautique.
	et phys. math.	HACKSPILL.....	Chimie (P. C. N.).
M ^{me} RAMART-LUCAS	Chimie organ.	M. CURIE.....	Physique (P. C. N.).

Secrétaire..... A. PACAUD
Secrétaire honoraire... D. TOMBECK



A MES PARENTS

A Monsieur le Professeur LOUIS DE BROGLIE
Membre de l'Institut

En témoignage de ma fidèle affection.

A Monsieur le Professeur JEAN PERRIN

Membre de l'Institut

*En témoignage de mon profond
respect et de ma reconnaissance.*

A Monsieur le Professeur MAURICE FRÉCHET

*Avec l'expression de mon entier
dévouement.*

A Madame le Professeur RAMART-LUCAS

*Respectueux hommage de ma vive
gratitude.*

RECHERCHES SUR LES MÉCANIQUES ONDULATOIRES ET LA SUPERQUANTIFICATION EN VUE D'UNE MÉCANIQUE GÉNÉRALE

Par M. JEAN-LOUIS DESTOUCHES

AVANT-PROPOS

L'esprit qui nous a guidé en écrivant cette thèse n'a pas été de nous borner à l'étude d'une question particulière, telle celle de la Superquantification à laquelle sont consacrées maintes pages du présent travail, mais de poursuivre un objectif plus vaste en examinant les principes des diverses théories quantiques et en nous efforçant d'en tirer des idées générales nouvelles.

C'est donc, avant tout, un essai de généralisation que nous avons tenté, convaincu que la comparaison des méthodes et la confrontation de leurs éléments fondamentaux nous conduiraient tout d'abord à préciser leurs analogies et leurs interdépendances, puis à les unifier dans leurs traits principaux et à les englober dans un même cadre. D'ailleurs, semblable but a déjà été atteint en d'autres domaines, en particulier ceux de l'Analyse et de la Géométrie.

Toutefois ce programme présente une telle ampleur qu'on ne saurait prétendre y parvenir sans de longs efforts. Il ne saurait être traité dans un seul travail. Aussi cette thèse, bien qu'apportant un premier ensemble d'aperçus nouveaux,

ne doit être considérée que comme une introduction, comme un préambule. Ce qui en constitue le caractère essentiel, c'est qu'elle fournit les éléments de base de la théorie générale que nous envisageons et qu'elle en fixe les directives. Dans notre deuxième thèse nous ferons un pas de plus en avant en parvenant aux énoncés des principes de cette théorie, puis, dans nos travaux ultérieurs, nous comptons nous consacrer à son développement.

..

La Mécanique ondulatoire qui, grâce à l'intuition géniale de Louis de Broglie, est venue apporter à l'étude d'un grand nombre de problèmes comme un lumineux flambeau, n'a été primitivement qu'une extension de l'ancienne Mécanique. Mais au fur et à mesure de ses développements, elle s'en est détachée progressivement pour former une théorie indépendante dans laquelle la Mécanique classique n'apparaît plus que comme une approximation analogue à celle de l'optique géométrique. Elle a suscité des méthodes nouvelles et conduit à des résultats qui ont bouleversé de façon inattendue les idées jusque-là admises sur le monde physique, et dont le plus important a été l'abandon d'un déterminisme rigoureux.

Cette première Mécanique ondulatoire en a fait ensuite éclore diverses autres de plus en plus éloignées des méthodes classiques, parmi lesquelles la Mécanique de Pauli, la Mécanique de Dirac, la Superquantification, la théorie quantique des champs.

Si, pendant la période de fièvre constructive marquée par une évolution trop rapide et trop changeante, il eût été hasardeux et prématuré de vouloir fixer les concepts de la Mécanique nouvelle, aujourd'hui qu'il semble y avoir dans cette marche en avant un ralentissement, une accalmie, même un temps d'arrêt, le moment paraît propice, dans le

champ de la logistique, pour « faire le point », autrement dit pour préciser les principes fondamentaux et présenter un exposé conceptuel et logique des théories quantiques.

Voilà seulement cinq années M. Hadamard ⁽¹⁾ dans la préface du livre de Birtwistle, constatait l'état chaotique qu'avaient créé les théories nouvelles, alors en plein développement, et déclarait : « Nous n'en sommes pas à une contradiction près ». Depuis lors, bien des difficultés ont pu s'aplanir, de sorte qu'aux désaccords du début a maintenant succédé une meilleure harmonie.

Ainsi stabilisée, la Mécanique ondulatoire a fini par conquérir son indépendance pour former à elle seule un ensemble autonome.

∴

Du fait de leur évolution, les théories quantiques apparaissent, à l'heure actuelle, sous deux aspects, à savoir : d'une part la Mécanique Ondulatoire Simple, aboutissement de la première Mécanique Ondulatoire, et les Mécaniques de Pauli et de Dirac qui lui ont apporté des perfectionnements ; d'autre part, les théories dérivées : Superquantification, théorie quantique des champs, etc. A ces deux aspects correspondent, comme nous le verrons, des caractères différents : au premier les mécaniques ondulatoires dans l'espace physique ou l'espace de configuration ; au second les mécaniques dans des espaces abstraits.

Non seulement nous voilà loin des raisonnements classiques, mais ces diverses théories reposent sur un schéma logique nouveau, qui fait précisément l'objet de notre étude.

Déjà, un certain nombre de travaux ont été publiés sur les fondements de la Mécanique Ondulatoire. Citons parmi les plus importants ceux de J. v. Neumann qui a spécialement étudié les propriétés des opérateurs.

C'est à un point de vue tout différent que nous nous som-

mes placé. Laissant de côté les développements et les applications des diverses théories quantiques, nous nous sommes attaché à l'étude de leurs principes fondamentaux, et au cadre mathématique auquel elles s'adaptent.

Ce cadre n'avait pas encore été étudié pour lui-même : il demeurait intimement lié aux conséquences physiques des théories sans qu'on eût cherché à l'en affranchir et à le considérer seul. Aussi nous sommes-nous appliqué, dans l'énoncé des principes, à séparer ce qui est proprement physique de ce qui appartient au cadre lui-même.

C'est ce cadre mathématique que nous avons voulu unifier pour les diverses théories quantiques, en utilisant leurs analogies communes qui, de ce fait, se trouvent mieux mises en lumière.

Pour atteindre ce but, nous avons été conduit à introduire certains espaces abstraits et à y définir des Mécaniques tant ponctuelles qu'ondulatoires. Grâce à ces Mécaniques abstraites, nous sommes parvenu à établir et à préciser, pour les diverses théories, des cadres tous semblables. Dès lors, ces mécaniques abstraites, dont nous avons fait ressortir l'utilité, les propriétés, les avantages, nous ont paru bien appropriées pour constituer l'armature des théories quantiques.

Ainsi apparentées, ces diverses théories apparaissent, au point de vue logique, comme les rameaux épars d'une théorie générale, à l'édification de laquelle ont tendu tous nos efforts.

Tel a été, en effet, le but principal que nous nous étions fixé : parvenir à une *Mécanique générale abstraite*, venant englober toutes les Mécaniques et synthétiser leurs principes communs.

La notion des espaces abstraits, dont la science est redevable aux beaux travaux de M. Fréchet, nous en a permis la réalisation. Alors que son rôle semblait devoir être réservé à l'analyse fonctionnelle et à la théorie des fonctions, elle trouve, en physique quantique, une application nouvelle,

pour le moins inattendue, dont nous avons, pour notre part, retiré grand profit.

..

Nous remercions M. Jean Perrin du grand honneur qu'il nous a fait en acceptant la présidence de cette thèse, ainsi que du bienveillant intérêt qu'il a constamment témoigné à nos travaux. Nous lui en gardons une bien vive gratitude.

A M. Louis de Broglie, qui a toujours été pour nous un guide si éclairé et si profondément dévoué, nous adressons de tout cœur l'expression de notre infinie reconnaissance ; si nous avons pu mener à bien notre thèse, c'est grâce à ses directives, de même qu'à la haute valeur de son enseignement.

A M. Fréchet nous devons bien des remerciements pour les encouragements et les conseils qu'il nous a prodigués. Nous avons trouvé en lui le plus précieux appui.

CHAPITRE PREMIER

Principes de la Mécanique Ondulatoire non relativiste et rôle des Opérateurs.

1. **Mécanique Ondulatoire d'un corpuscule.** — Nous ne rappellerons pas ici le point de départ des grandes conceptions de Louis de Broglie ⁽¹⁾ qui l'ont conduit à associer une onde à un mouvement corpusculaire, à considérer la mécanique ponctuelle comme une approximation équivalente à l'optique géométrique, et à adopter ainsi que Schrödinger ⁽²⁾ pour équation d'ondes rigoureuse du mouvement d'un corpuscule dans un champ de forces de potentiel $V(x, y, z, t)$:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \Delta\psi + V(x, y, z, t)\psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (1)$$

Cette équation peut être retrouvée en partant d'expressions de la mécanique classique, et c'est alors qu'apparaissent des opérateurs dont le rôle a été grandissant dans les théories quantiques : si on prend la « fonction hamiltonienne » H exprimée en fonction des coordonnées rectangulaires du point mobile x_j et des moments conjugués p_j et qu'on remplace les p_j par les opérateurs $\mathbf{P}_j = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_j}$ on obtient un opérateur appelé « Hamiltonien ». On constate alors que l'équation :

$$\mathbf{H}(x_1, x_2, x_3; \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \mathbf{P}_3; t)\psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (1')$$

est identique à l'équation (1).

Les opérateurs $\mathbf{P}_j$ correspondent à la j^{e} composante de la

quantité de mouvement et, lorsque l'approximation de l'optique géométrique est valable, on trouve que :

$$\mathbf{P}_j \psi \simeq p_j \psi$$

qui montre bien que $\mathbf{P}_j$ correspond au moment p_j . Un autre opérateur que $\mathbf{P}_j$ ne donnerait pas d'une part l'équivalence à p_j , d'autre part une équation (1') identique à (1). Au vecteur $\vec{p}$ de composantes p_j correspond alors un opérateur vectoriel $\vec{\mathbf{P}}$ égal à $-\frac{h}{2\pi i} \nabla$.

Le sens physique de l'onde ψ est donné par le principe des interférences qui fixe les probabilités de présence, et par le principe de décomposition spectrale de Born qui fixe les probabilités des valeurs de l'énergie. C'est l'application de ces deux principes qui conduit aux relations d'incertitude de Heisenberg.

2. Mécanique Ondulatoire des systèmes — Pour un système de N corpuscules Schrödinger est parti de l'idée que l'on doit lui associer une onde se propageant dans l'espace de configuration (R_{3N}) correspondant (le point figuratif du système dans cet espace a pour coordonnées les $3N$ coordonnées $x_1, y_1, \dots, z_N$ des N points du système). Pour que le raccord avec la mécanique classique soit possible, il faut que l'optique géométrique de cette propagation donne l'équation de Jacobi : c'est cette condition que nous désignerons dans la suite sous le nom de « critère de Louis de Broglie ».

Pour obtenir l'équation de propagation de l'onde ψ associée au système, le moyen le plus simple a été d'employer le procédé formel qui a réussi dans le cas d'un seul corpuscule : on remplace dans la fonction hamiltonienne classique $H(x_1 \dots x_N; p_{x_1}, \dots, p_{x_N}; t)$ les moments p_{x_j} par les opérateurs $\mathbf{P}_{x_j} = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_j}$, d'où l'hamiltonien et l'équation d'ondes :

$$\mathbf{H}\psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

On vérifie que les ondes ψ satisfont bien au critère de Louis de Broglie.

Le sens physique de cette onde ψ est encore donnée par un principe des interférences et un principe de décomposition spectrale. Mais on doit remarquer combien cette propagation dans un espace de configuration à plus de trois dimensions possède un caractère abstrait qui l'oppose aux propagations d'ondes à caractère concret de l'ancienne physique. C'est là le premier pas vers la considération d'ondes dans des espaces abstraits que nous définirons dans le cours de ce travail.

3. La méthode de quantification de Schrödinger. — Schrödinger ⁽³⁾ a été amené à remplacer les conditions quantiques de la théorie ancienne par de nouvelles conditions, adaptées à la mécanique ondulatoire. Soit un système formé de N corpuscules placés dans un champ extérieur V indépendant du temps (condition nécessaire pour qu'il y ait des états stationnaires). On peut considérer alors une solution monochromatique de la forme :

$$\psi = a(x_1, \dots, x_N) e^{\frac{2\pi i}{h} Et}$$

et l'équation d'ondes se transforme en :

$$\sum_{j=1}^N \frac{1}{m_j} \left(\frac{\partial^2 a}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial y_j^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial z_j^2} \right) + \frac{8\pi^2}{h^2} [E - V(x_1 \dots x_N)] a = 0.$$

La nouvelle méthode de quantification consiste essentiellement à imposer certaines conditions à la fonction a , qui doit être : *finie, uniforme, continue dans un certain domaine D de l'espace de configuration, et être nulle aux limites de D .*

Or on sait qu'une telle équation ne peut admettre dans un domaine D fini de solutions satisfaisant à ces conditions que pour certaines valeurs $E_1, E_2, \dots$ de la constante E ; ces valeurs particulières s'appellent les *valeurs propres* de l'équation aux dérivées partielles.

A chaque valeur propre E_j correspond une (ou plusieurs dans le cas de dégénérescence) solution finie, uniforme, continue et nulle aux limites de D , c'est la *fonction propre* correspondante ou, selon Henri Poincaré, la *fonction fondamentale*. On appelle *spectre* d'une équation l'ensemble de ses valeurs propres. Si le domaine D est fini, le spectre est discontinu.

On démontre alors que les fonctions propres forment un système orthogonal, et qu'elles sont de carré sommable. Comme elles ne sont déterminées qu'à une constante multiplicative près, on les norme. Donc, dans le cas d'un spectre discontinu :

$$\int a_i^* a_j d\tau = \delta_{ij}$$

δ_{ij} étant égal à 1 si $i = j$, et à zéro dans les autres cas. Au lieu de a_i et a_j on peut faire figurer ψ_i et ψ_j .

Si le domaine D est infini, le spectre peut être en partie discontinu et en partie continu. Mais alors dans la partie continue les fonctions propres ne sont pas nulles en général à l'infini et ne sont pas de carré sommable. Pour étendre les résultats du cas du spectre discontinu au cas du spectre continu, Weyl et Fues ont montré qu'il ne fallait plus considérer les fonctions propres mais les différentielles propres définies comme il suit : $a(E)$ étant la fonction propre correspondant à la valeur E du spectre continu, on divise l'intervalle dans lequel peut être choisie la valeur E en un ensemble dénombrable d'intervalles infiniment petits ΔE_i et on appelle « différentielle propre » l'expression :

$$a_{\Delta E_i} = \frac{1}{\sqrt{\Delta E_i}} \int_E^{E + \Delta E_i} a(E) dE.$$

On démontre alors que les différentielles propres fonctions du point figuratif sont de carré sommable ; on peut donc les normer puisqu'elles ne sont déterminées qu'à une constante

multiplicative près. De plus, on montre qu'elles forment un système orthogonal.

On démontre aussi que le système des fonctions propres et des différentielles propres est complet, c'est-à-dire que toute fonction $f(x_1, \dots, x_N)$ satisfaisant aux mêmes conditions que les fonctions propres dans le domaine D est développable en série de la forme :

$$f(x_1, \dots, x_N) = \sum_i c_i a_i(x_1 \dots x_N) + \int c(E) a(E; x_1, \dots, x_N) dE$$

ou en faisant figurer les différentielles propres :

$$f(x_1, \dots, x_N) = \sum_i c_i a_i + \sum_j c(E_j) a_{\Delta E_j}.$$

Ainsi, d'après Schrödinger, les conditions de quanta se traduisent en mécanique ondulatoire par des restrictions sur les solutions de l'équation d'ondes qu'on peut adopter pour qu'elles correspondent à un mouvement possible.

4. Nécessité d'une forme générale de la mécanique ondulatoire. — L'interprétation physique de la mécanique ondulatoire, que nous venons de résumer très brièvement, ainsi ramenée au principe des interférences et au principe de décomposition spectrale n'est pas satisfaisante, comme le fait remarquer Louis de Broglie, d'abord, parce qu'elle est incomplète, ne donnant pas la probabilité pour qu'une expérience permette d'assigner à une grandeur mécanique quelconque une valeur donnée ; puis parce que, cette première théorie n'est pas très homogène, le principe de décomposition spectrale et le principe des interférences apparaissant comme tout à fait distincts et n'ayant aucun lien entre eux.

Dans une théorie plus satisfaisante qu'ont élaborée principalement Heisenberg, Jordan, Schrödinger, Dirac, Weyl, il a été possible à Louis de Broglie d'énoncer un principe de

décomposition spectrale unifiant et complétant la première théorie.

La mécanique ondulatoire dérive d'une équation qu'on peut écrire :

$$\mathbf{H}\psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (1'')$$

qui, dans le cas de champs constants, peut être mise sous la forme :

$$\mathbf{H}\psi = E\psi \quad (2)$$

$\mathbf{H}$ étant l'opérateur hamiltonien, E une constante égale à l'énergie du système et, d'après Schrödinger, égale à une valeur propre de l'équation (2), ou encore, dirons-nous, à une valeur propre de l'opérateur $\mathbf{H}$.

Ainsi, à la grandeur « énergie » de la théorie classique, on a fait correspondre un opérateur. On étend cette méthode au cas d'un champ variable en considérant le temps comme un paramètre dont dépendent les valeurs propres et les fonctions propres.

A chaque composante de la quantité de mouvement on a fait correspondre un opérateur, et à l'approximation de l'optique géométrique :

$$\mathbf{P}_{x_k}\psi \approx p_{x_k}\psi.$$

Par analogie avec le cas de l'énergie, il a semblé naturel de dire que l'on ne pourrait trouver comme valeurs du moment p_{x_k} que les valeurs propres de l'équation :

$$\mathbf{P}_{x_k}\psi = p_{x_k}\psi$$

ou « les valeurs propres de l'opérateur $\mathbf{P}_{x_k}$ ».

Le développement de la mécanique ondulatoire a conduit à généraliser cette idée, à associer à chaque grandeur mécanique un opérateur, et à poser en principes :

1° qu'on ne pouvait, si l'on effectuait une mesure à l'ins-

tant l , trouver pour la grandeur qu'une des valeurs propres de l'opérateur correspondant ;

2° que les probabilités de ces valeurs étaient données par le carré du module des coefficients dans le développement de $\frac{1}{2}$ en série de fonctions propres de l'opérateur considéré.

On étend ainsi à toute grandeur ce qu'on sait vrai pour l'énergie.

Si l'on adopte comme opérateur correspondant à une coordonnée rectangulaire q_k d'un corpuscule l'opérateur $\mathbf{Q}_k$:

$$\mathbf{Q}_k = \text{multiplication par } q_k,$$

ce que nous écrirons :

$$\mathbf{Q}_k = q_k.$$

On trouve alors comme fonctions propres des fonctions de Dirac $\delta(q - q_k)$. On constate que le principe des interférences n'est autre que le principe (2°) lorsqu'on considère l'opérateur $\mathbf{R}$ produit de tous les opérateurs coordonnées $\mathbf{Q}_k$.

Les opérateurs $\mathbf{P}$ et $\mathbf{Q}$ nous étant ainsi connus, on est amené à admettre que les opérateurs correspondant aux autres grandeurs mécaniques telles que l'énergie, les moments de rotation, etc... qui, en mécanique classique, sont des grandeurs dérivées dont l'expression se forme à partir des coordonnées q_k et des moments p_k , s'obtiendront en remplaçant dans ces expressions les coordonnées q_k et les moments p_k par les opérateurs $\mathbf{Q}_k$ et $\mathbf{P}_k$, comme c'était le cas pour l'énergie.

Il peut se présenter des cas où il y a ambiguïté, car une même fonction des q_k et p_k peut conduire à plusieurs opérateurs différents suivant la façon dont on l'écrit. Ainsi $q_k p_k = p_k q_k$, tandis qu'on a :

$$\mathbf{Q}_k \mathbf{P}_k - \mathbf{P}_k \mathbf{Q}_k = \frac{h}{2\pi i}.$$

Heureusement, chaque fois que l'on a affaire à un système de corpuscules non liés et que l'on emploie des coordonnées rectangulaires, la construction des opérateurs se fait sans ambiguïté.

5. Fonctions propres et différentielles propres. — Les définitions des fonctions propres et différentielles propres que nous avons données pour l'opérateur **H** ne conviennent pas. Les conditions qu'on impose sont trop restrictives, et nous devons les modifier.

Considérons un opérateur linéaire **A**. Les valeurs propres et fonctions propres sont définies par l'équation :

$$\mathbf{A}\varphi = \alpha\varphi.$$

Nous avons dit que, si α est une valeur propre, il lui correspond une (ou plusieurs) fonction propre φ finie, uniforme, continue dans le domaine D fini ou infini de l'espace de configuration, et nulle aux limites de D dans le cas de spectres discontinus. Dans le cas de spectres continus, ce sont les différentielles propres qui doivent satisfaire à ces conditions.

Pour les opérateurs rencontrés en mécanique ondulatoire s'ils admettent des fonctions propres ou différentielles propres ainsi définies, elles sont de carré sommable. De plus, ces opérateurs sont des combinaisons d'opérateurs **P** et **Q**. Certains sont donc des opérateurs différentiels, par suite on est sûr que pour ceux-là les fonctions propres sont dans un certain domaine finies et continues. Quand le domaine D est infini, la condition d'être nulle aux limites du domaine est remplie en moyenne quadratique si l'on impose aux fonctions propres d'être de carré sommable.

D'autre part, pour n'avoir qu'une seule notation pour les fonctions propres et différentielles propres, nous allons nous appuyer sur le fait que nous pouvons considérer une fonction propre du spectre discontinu comme la limite d'une

différentielle propre d'un spectre continu infiniment étroit, c'est-à-dire poser :

$$\varphi_i = \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ \Delta\alpha_n \rightarrow 0}} \frac{1}{\sqrt{\Delta\alpha_n}} \int_{\Delta\alpha_n} \varphi_n(\alpha) d\alpha$$

$\varphi_n(\alpha)$ étant une fonction de α augmentant indéfiniment avec n pour la valeur α_i de l'ordre d'infinitude de $\sqrt{\Delta\alpha_n}$ lorsque $\Delta\alpha_n$ tend vers zéro. Ceci nous permet de ne plus avoir qu'une seule notation pour les fonctions propres et les différentielles propres en généralisant les deux notations pour les rendre équivalentes : nous choisirons d'abord une décomposition de l'intervalle $\alpha_0 \rightarrow \alpha_1$ dans lequel se trouvent toutes les valeurs propres en éléments de largeur infiniment petite $\Delta\alpha_i$ formant un ensemble dénombrable.

A un intervalle $\Delta\alpha_j$ du spectre continu correspond la différentielle propre $\varphi_{\Delta\alpha_j}$ ou φ_j :

$$\varphi_j = \varphi_{\Delta\alpha_j} = \frac{1}{\sqrt{\Delta\alpha_j}} \int_{\Delta\alpha_j} \varphi(\alpha) d\alpha.$$

φ_j jouera le rôle de j^{e} fonction de base dans le système orthonormal des fonctions propres.

Pour un intervalle $\Delta\alpha_k$ comprenant une valeur propre du spectre discontinu, φ_k devra être la k^{e} fonction propre.

Nous prolongerons alors la fonction $\varphi(\alpha)$ définie dans les intervalles où le spectre est continu, en posant :

$$(\hat{\varphi} \alpha) = \begin{cases} \varphi(\alpha) & \text{pour } \alpha \text{ dans le spectre continu} \\ \sqrt{\Delta\alpha_k} \varphi_k \delta(\alpha - \alpha_k) & \text{dans l'intervalle } \Delta\alpha_k \text{ entourant } \alpha_k \\ 0 & \text{dans les intervalles } \Delta\alpha \text{ où il n'y} \\ & \text{a pas de valeur propre.} \end{cases}$$

On aura alors pour expression de la i^{e} différentielle propre :

$$\varphi_i = \varphi_{\Delta\alpha_i} = \frac{1}{\sqrt{\Delta\alpha_i}} \int_{\Delta\alpha_i} \hat{\varphi}(\alpha) d\alpha.$$

On a ainsi un seul ensemble dénombrable de φ_i formé des fonctions propres et des différentielles propres : nous les désignerons dans les deux cas sous le terme de « différentielles propres généralisées ».

Si les valeurs propres ne sont pas bornées, ce qui a lieu en général, il suffit de faire croître indéfiniment l'intervalle $\alpha_0 \rightarrow \alpha_1$, les définitions restent sans changement.

On peut alors modifier comme suit la définition d'une fonction propre :

« Une fonction $\varphi(\alpha)$ sera une fonction propre correspondant à la valeur propre α si 1° $\mathbf{A}\varphi(\alpha) = \alpha\varphi(\alpha)$, 2° la différentielle propre $\varphi_{\Delta x}$ associée à cette valeur α est uniforme et de carré sommable ».

Si l'on considère un opérateur $\mathbf{Q}_i$, les fonctions propres, sont des fonctions δ et satisfont bien à ces dernières conditions, mais non à celles trop restrictives d'être partout finies et continues.

Si l'on considère un opérateur $\mathbf{P}_i$, les fonctions propres, étant dérivables partout, sont partout finies et continues.

Si l'on considère l'opérateur $\mathbf{H}$, on constate que les fonctions propres sont finies et continues partout, sauf certaines d'entre elles qui peuvent ne pas l'être sur l'ensemble des points où le potentiel V est infini (points où se trouvent les charges). Là encore, comme pour l'opérateur $\mathbf{Q}_i$, les conditions qu'une fonction propre soit partout finie et continue étaient trop restrictives.

Aux points où V est infini, les fonctions propres peuvent être aussi infinies, mais doivent cependant être de carré sommable. Ainsi, la condition pour une fonction propre d'être de carré sommable joue un rôle fondamental.

5. Propriétés des fonctions ψ . — Les fonctions ψ doivent satisfaire aux mêmes conditions que les différentielles propres, c'est-à-dire être : 1° uniformes, 2° nulles aux limites du domaine D , et 3° de carré sommable, 4° en

outre, les seuls points où elles peuvent être ni finies ni continues sont d'une part ceux où le potentiel V est infini, d'autre part les sources de corpuscules. La troisième condition est vérifiée si, à l'instant initial, la fonction ψ est de carré sommable, car sa norme conservera la même valeur au cours du temps. Il suffit donc de prendre une fonction ψ initiale de carré sommable.

La condition 2^o est vérifiée d'elle-même quand le domaine D est infini, par suite de la forme de l'équation d'ondes. Ici encore les conditions pour une fonction ψ d'être finie et continue partout sont trop restrictives, car, lorsque le potentiel V est infini, la fonction ψ peut être infinie, et aux points qui sont des sources de corpuscules la fonction ψ est nécessairement infinie.

Le principe de décomposition spectrale conduit à décomposer la fonction ψ suivant les différentielles propres d'un opérateur, et on est amené à appliquer un opérateur à la fonction ψ d'une part pour obtenir la valeur moyenne d'une grandeur, d'autre part pour calculer dans un système de base les éléments de matrice associés à un opérateur, enfin $H\psi$ figure dans l'équation d'ondes.

Le principe de décomposition spectrale suppose que les opérateurs de la mécanique ont un spectre réel, tel que les fonctions propres et différentielles propres forment un système de base complet pour les fonctions ψ . Pour caractériser l'ensemble des fonctions ψ et des fonctions $A\psi$, c'est-à-dire l'ensemble des fonctions utilisées en mécanique quantique, il faut étudier d'abord les opérateurs puisqu'ils sont donnés *a priori*.

7. Classification des opérateurs. — Nous pouvons ranger les opérateurs rencontrés en mécanique ondulatoire simple qui correspondent à des grandeurs physiques en six classes :

1^o Les opérateurs coordonnées Q qui sont des opérateurs multipliant la fonction opérée par une des coordonnées du

point figuratif du système. Ils opèrent sur toutes les fonctions définies sur l'ensemble des valeurs de la variable qu'on considère.

2° Les opérateurs multiplication par une fonction uniforme du point de l'espace de configuration et du temps, comme le potentiel, et soumise à certaines conditions dont celle de devenir nulle à l'infini, et celle que $V\psi$ soit de carré sommable. Ces opérateurs opèrent sur toutes les fonctions qui sont définies sur un sous-ensemble de l'ensemble sur lequel la fonction multiplicatrice est définie.

3° Les opérateurs P_i moments conjugués des coordonnées, qui sont des opérateurs différentiels du premier ordre. Ils opèrent sur toutes les fonctions dérivables de la variable correspondante.

4° Les opérateurs fonction multilinéaire des Q_i comme est par exemple, l'opérateur répartition R produit des opérateurs coordonnées. Ils opèrent sur toutes les fonctions opérables par chacun des opérateurs Q .

5° Les opérateurs fonction multilinéaire des P_i et des Q_j , comme sont les moments de rotation. Ils opèrent sur toutes les fonctions opérables séparément par chaque P_i et chaque Q_j .

6° L'opérateur hamiltonien qui est une fonction quadratique des P_i et fonction linéaire du potentiel. Il opère sur toutes les fonctions dérivables deux fois, qui appartiennent à l'ensemble des fonctions opérables par la fonction potentielle.

En outre, on aura à utiliser certains opérateurs qui ne correspondent à aucune grandeur physique, et qui appartiennent à la classe des opérateurs *isométriques* et des opérateurs *unitaires*. Ils ont pour propriété de conserver la norme. Les opérateurs isométriques ne peuvent opérer que sur un certain ensemble de fonctions de carré sommable, tandis que les opérateurs unitaires peuvent opérer sur toutes les fonctions de carré sommable.

Lorsqu'on applique ces sept classes d'opérateurs à des

fonctions qui ne sont pas quelconques, la fonction obtenue peut conserver certaines propriétés de la fonction opérée. Par exemple, si on applique un opérateur $\mathbf{Q}$ à une fonction continue dans un certain domaine D , on obtient une fonction continue dans le même domaine.

Nous allons examiner maintenant les propriétés qui se conservent quand des opérateurs mécaniques (opérateurs correspondant à des grandeurs mécaniques) sont appliqués à une fonction d'ondes ψ . Si l'on applique un opérateur coordonnée à une fonction ψ , la fonction obtenue est uniforme, elle est finie, continue et dérivable dans les mêmes domaines que la fonction opérée, de plus elle est de carré sommable, même dans le cas d'un domaine D infini, en vertu de la forme de l'équation d'ondes.

Si l'on applique un opérateur $\mathbf{P}$ à une fonction ψ , la fonction obtenue est dérivable une fois dans le même domaine que celui où la fonction ψ est dérivable deux fois. En vertu de la forme de l'équation d'ondes, on vérifie encore que la fonction obtenue est de carré sommable.

Pour les opérateurs mécaniques des autres classes qui sont formés à l'aide d'opérateurs $\mathbf{P}$ et $\mathbf{Q}$, on pourrait examiner de même les propriétés qui se conservent. Mais les seules propriétés communes que l'on puisse énoncer pour l'ensemble des opérateurs correspondant à une grandeur mécanique est qu'ils doivent pouvoir opérer sur toute fonction d'ondes ψ , et que la fonction obtenue doit être de carré sommable.

8. Espace (ψ_1) . — Nous venons de voir que l'ensemble des fonctions que nous avons à utiliser : fonctions ψ et fonctions obtenues en appliquant un opérateur mécanique $\mathbf{A}$ à une fonction ψ , possèdent une propriété commune, celle d'être de carré sommable. Or, on sait que l'ensemble des fonctions de carré sommable constitue un espace de Hilbert. Les fonctions ψ et $\mathbf{A}\psi$ sont donc des éléments de cet espace.

Si les opérateurs possèdent un spectre, le principe de

quantification exige qu'il soit réel et, si les fonctions d'ondes sont développables en série de fonctions propres et de différentielles propres de cet opérateur, le principe de décomposition spectrale nous indique que les carrés du module des coefficients ont un sens physique et définissent une probabilité. Si l'on appelle « cas pur » pour un opérateur considéré, le cas où la fonction ψ se réduit à une fonction propre, le principe de décomposition spectrale exige qu'une fonction quelconque soit un mélange de cas purs. Ceci impose donc deux conditions de plus pour qu'un opérateur soit un opérateur mécanique : A) il devra avoir un spectre réel, B) ce spectre sera tel que les fonctions propres et les différentielles propres forment un système complet pour les variables intéressant cet opérateur.

S'il est très difficile de classer tous les opérateurs satisfaisant à ces conditions, on vérifie que les opérateurs rencontrés y satisfont.

La fonction ψ représente l'état du système mécanique. Pour que les fonctions ψ et les fonctions $\mathbf{A}\psi$ forment un espace, il faut définir deux éléments infiniment voisins. D'après le principe de décomposition spectrale, on voit que deux fonctions ψ pourront être considérées comme infiniment voisines si tous les coefficients du développement dans un certain système de base ont des modules infiniment voisins. Ce voisinage des coefficients peut être défini par l'intermédiaire d'une distance. En effet, soient φ et ψ deux fonctions d'ondes dont les composantes soient respectivement les a_i et les c_i .

Nous sommes conduit à poser :

$$\text{distance } \{ \varphi, \psi \} = \sqrt{\sum_i (a_i^* - c_i^*) (a_i - c_i)}.$$

Les ψ étant de carré sommable, on reconnaît là l'expression de la distance dans un espace de Hilbert exprimée dans un certain système de base.

Nous sommes donc amené à prendre pour espace (ψ_1) l'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable. Les ψ et les $\mathbf{A}\psi$ en sont des éléments, et on démontre qu'ils forment un ensemble partout dense, car les ψ sont des fonctions dérivables deux fois, et on démontre que ces dernières sont partout denses.

En résumé on voit que :

1^o Les fonctions ψ et $\mathbf{A}\psi$ sont des éléments de l'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable ;

2^o Que c'est cet espace de Hilbert qu'il faut considérer, car : a) l'expression de la distance à adopter pour deux fonctions ψ en vertu du principe de décomposition spectrale est celle de deux éléments de cet espace, b) c'est l'espace de Hilbert et non un sous-ensemble que l'on doit considérer, car les opérateurs mécaniques $\mathbf{A}$ qu'on rencontre sont divers et ne conservent pas dans leur ensemble d'autres propriétés des fonctions ψ que celle que les fonctions $\mathbf{A}\psi$ soient de carré sommable.

Ainsi, les opérateurs mécaniques sont des opérateurs de l'espace de Hilbert. Ceci nous amène à rappeler quelques propriétés d'un espace de Hilbert.

9. Espace de Hilbert abstrait. — Cet espace a été défini sous la forme suivante par J. von Neumann ⁽⁴⁾ et par M. H. Stone ⁽⁵⁾ : une classe $(\mathfrak{H})$ d'éléments abstraits $f, \dots, g, \dots$ est appelée un espace de Hilbert si elle satisfait aux postulats que voici :

Postulat 1. — $(\mathfrak{H})$ est un espace *linéaire*, c'est-à-dire que :

1^o Il existe une opération commutative et associative représentée par le symbole $+$ applicable à chaque paire f, g d'éléments de $(\mathfrak{H})$ avec la propriété que $f + g$ est aussi un élément de $(\mathfrak{H})$;

2^o Il existe une opération distributive et associative représentée par le symbole $.$ applicable à chaque paire a, f où a est un nombre complexe et f un élément de $(\mathfrak{H})$, avec

les propriétés que $1.f = f$ et que $a.f$ soit un élément de $(\mathfrak{H})$;

3° Dans $(\mathfrak{H})$ il existe un élément zéro représenté par 0 , avec les propriétés :

$$f + 0 = f, \quad a.0 = 0, \quad 0.f = 0.$$

Postulat 2. — Produit scalaire : il existe un nombre que nous désignerons par $(f.g)$ défini pour chaque paire f, g d'éléments de $(\mathfrak{H})$ avec les propriétés suivantes :

$$1^0 (f.ag) = a(f.g);$$

$$2^0 ([f_1 + f_2].g) = (f_1.g) + (f_2.g);$$

$$3^0 (g.f) = (f.g)^*;$$

$$4^0 (f.f) \geq 0; (f.f) \text{ est appelée la norme de } f;$$

$$5^0 (f.f) = 0 \text{ si et seulement si } f = 0.$$

On démontre que $([f - g].[f - g])$ joue le rôle de carré de la distance des éléments f et g , et que le produit scalaire satisfait à l'inégalité de Schwarz :

$$|(f.g)|^2 \leq (f.f)(g.g)$$

puis, à partir de là, que $(\mathfrak{H})$ est un espace vectoriel. On appellera *vecteur* f le vecteur $\overrightarrow{of}$ d'origine 0 et d'extrémité f , et $\|f\|$ sera sa longueur définie comme suit :

$$\|f\| = \text{distance } \{0, f\} = \sqrt{(f.f)}.$$

En vertu de l'inégalité de Schwarz on a :

$$\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\|.$$

Comme par définition une suite d'éléments f_n converge vers un élément f si la distance $\{f_n, f\}$ tend vers 0 avec $\frac{1}{n}$, de cette définition on déduit que la suite f_n converge vers un élément f si $\|\overrightarrow{f_n f}\|$ tend vers zéro avec $\frac{1}{n}$.

Ces trois propriétés sont les conditions nécessaires et suffisantes pour qu'un espace soit vectoriel.

Postulat 3. — Pour chaque entier n il existe un ensemble de n éléments de $(\mathfrak{H})$ linéairement indépendants $f_1, f_2, \dots, f_n$, c'est-à-dire tels que l'équation $a_1 f_1 + a_2 f_2 + \dots + a_n f_n = 0$ soit vérifiée seulement quand : $a_1 = a_2 = \dots = a_n = 0$.

Postulat 4. — $(\mathfrak{H})$ est séparable, c'est-à-dire qu'il existe un ensemble dénombrable $f_1, \dots, f_n, \dots$, tel que pour chaque élément g de $(\mathfrak{H})$ et chaque nombre ε , il existe un nombre $n(g, \varepsilon)$ pour lequel $\|f_n - g\| < \varepsilon$.

Postulat 5. — $(\mathfrak{H})$ est complet c'est-à-dire que, si une suite $f_1, \dots, f_n, \dots$ d'éléments de $(\mathfrak{H})$ satisfait à la condition que $\|f_n - f_m\|$ tende vers zéro quand m et n croissent indéfiniment, il existe un élément f de $(\mathfrak{H})$ vers lequel converge la suite f_n ; autrement dit, la distance est telle qu'elle donne lieu à une généralisation du critère de Cauchy.

Rappelons quelques propriétés essentielles de l'espace de Hilbert pour le développement desquelles nous renvoyons à l'ouvrage de Stone ⁽⁵⁾ :

On appelle « ensemble orthonormal » un ensemble d'éléments satisfaisant à la condition :

$$(\varphi_n, \varphi_m) = \delta_{mn} = \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq n \\ 1 & \text{si } m = n \end{cases}$$

On démontre qu'il existe des systèmes orthonormaux complets.

Les cinq propriétés suivantes pour un système orthonormal sont équivalentes, et l'une d'elles entraîne les quatre autres :

1° $\{\varphi_n\}$ est complet :

2° Si pour toutes les fonctions φ_n le produit scalaire est nul, la fonction f est égale à 0 ;

3° La multiplicité fermée déterminée par l'ensemble des φ_n est l'espace entier $(\mathfrak{H})$.

4° Pour chaque fonction f de l'espace on a :

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n$$

avec $a_n = (\varphi_n, f_n)$;

5° Pour chaque paire d'éléments f, g dans $(\mathfrak{H})$, l'identité de Parseval est vérifiée :

$$(f, g) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* b_n.$$

avec :

$$a_n = (\varphi_n, f) \quad ; \quad b_n = (\varphi_n, g).$$

On établit que la classe $(\mathfrak{H}_0)$ de toutes les suites de nombres complexes $x_1 \dots x_n \dots$ telles que $\sum |x_n|^2$ converge, constitue un espace de Hilbert à condition de poser que : 1° si f est un point de coordonnées $x_1 \dots x_n \dots$, et g de coordonnées $y_1 \dots y_n \dots$, $f + g$ est le point de coordonnées $x_1 + y_1, \dots x_n + y_n \dots$; 2° $a.f$ est le point de coordonnées $ax_1 \dots ax_n \dots$; 3° 0 est le point de coordonnées nulles ;

$$4^\circ \text{ enfin } (f, g) = \sum_{n=1}^{\infty} x_n^* y_n.$$

On peut effectuer une correspondance biunivoque, bicontinue, conservant les distances, entre tout espace de Hilbert $(\mathfrak{H})$ et l'espace $(\mathfrak{H}_0)$, c'est-à-dire qu'il existe une « application » entre les espaces $(\mathfrak{H})$ et $(\mathfrak{H}_0)$.

Cette correspondance détermine dans $(\mathfrak{H})$ un système de coordonnées.

On montre aussi que si E est un ensemble mesurable de mesure finie ou infinie dans un espace euclidien à n dimensions (R_n) , et P un point variable sur E , l'ensemble des fonctions complexes mesurables $f(P)$ définies presque partout dans E pour lesquels l'intégrale $\int_E |f(P)|^2 d\tau$ existe

forme un espace de Hilbert $(\mathfrak{H}_1)$ en posant : 1° que deux fonctions sont considérées comme identiques si et seulement si elles sont égales presque partout dans E ; 2° les opérations $+$ et $\cdot$ sont définies comme l'addition et la multiplication ordinaires ; 3° l'élément 0 est la fonction nulle presque partout dans E ; 4° le produit scalaire (f, g) est défini par :

$$(f, g) = \int_E f(P) \bar{g}(P) d\tau_P.$$

Remarquons què, étant donnée une suite $f_1 \dots f_n \dots$, si $\|f_n - f\|$ tend vers zéro avec $1/n$, f_n tend vers f en moyenne quadratique.

Nous voyons qu'en mécanique ondulatoire, nous avons à considérer un ensemble E constitué par un domaine fini ou infini de l'espace (R_{3N}) ; que les fonctions ψ sont des éléments de l'espace $(\mathfrak{H}_1)$, et que le principe de décomposition spectrale nous conduit à faire une correspondance avec l'espace $(\mathfrak{H}_0)$. L'espace (ψ_1) est identique à l'espace $(\mathfrak{H}_1)$.

D'une façon plus générale, à un principe de décomposition spectrale devront toujours être associées des fonctions ψ d'un espace de Hilbert, au moyen d'une correspondance avec l'espace $(\mathfrak{H}_0)$.

10. Les opérateurs mécaniques et l'espace de Hilbert $(\mathfrak{H}_1)$.

— Les opérateurs employés en mécanique ondulatoire doivent être considérés comme des transformations dans l'espace $(\mathfrak{H}_1)$, puisqu'ils changent une fonction ψ de cet espace en une autre fonction φ du même espace.

On démontre que si $\mathbf{A}$ est l'un de ces opérateurs, il possède les propriétés suivantes :

- 1° Il est linéaire, c'est-à-dire que $\mathbf{A}(f + g) = \mathbf{A}f + \mathbf{A}g$;
- 2° Il existe au moins un système orthonormal complet dont tous les éléments φ_n soient opérables par l'opérateur $\mathbf{A}$;
- 3° Il existe un opérateur $\mathbf{A}^+$ appelé opérateur adjoint de $\mathbf{A}$ et un seul, tel que :

$$(\mathbf{A}f, g) = (f, \mathbf{A}^+g),$$

f et g étant des éléments quelconques de $(\mathfrak{H}_1)$ opérables respectivement par $\mathbf{A}$ et par $\mathbf{A}^+$;

4° Il existe un opérateur adjoint de $\mathbf{A}^+$, soit $\mathbf{A}^{++}$;

5° $\mathbf{A}$ est « hermitique » c'est-à-dire que, outre ces quatre conditions, on a :

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^{++}.$$

On démontre ⁽⁶⁾ alors qu'un opérateur hermitique a au moins une valeur spectrale, et que le spectre est réel. Il peut être en partie continu et en partie discontinu. Le spectre discontinu forme un ensemble soit vide, soit fini, soit dénombrable, et les fonctions propres sont orthogonales de même que les différentielles propres du spectre continu lorsqu'il existe.

A un opérateur $\mathbf{A}$ on peut associer dans un système de base φ_n opérable par $\mathbf{A}$ une matrice dont les éléments sont définis par :

$$a_{mn}^{(\varphi)} = (\varphi_m, \mathbf{A}\varphi_n),$$

et $|a_{mn}^{(\varphi)}|^2$ possède un sens physique.

Cette matrice n'existe que si tous les φ_n sont opérables par $\mathbf{A}$.

Mais, comme l'a montré J. von Neumann ⁽⁷⁾, on ne peut utiliser en général les matrices associées pour étudier un opérateur car il n'y a pas correspondance biunivoque entre les deux : la matrice n'existe que pour certains systèmes de base, et à une matrice donnée correspondent généralement plusieurs opérateurs.

Ce sont donc bien des opérateurs et non des matrices qui doivent jouer un rôle fondamental en mécanique ondulatoire, et correspondre à des grandeurs physiques.

On doit remarquer que l'on n'utilise qu'une toute petite partie de l'espace de Hilbert $(\mathfrak{H}_1)$, d'une part l'ensemble des fonctions d'ondes, d'autre part les fonctions obtenues lorsqu'on applique aux fonctions d'ondes un opérateur mécani-

que. Comme systèmes de base, nous n'avons à utiliser que ceux formés par les fonctions propres d'un opérateur mécanique. On doit remarquer que l'ensemble des fonctions utilisées forme un ensemble dense partout dans l'espace ($\mathfrak{H}_1$).

11. Concepts et postulats de la Mécanique ondulatoire simple. — Pour compléter ce rapide aperçu, il nous reste à fixer un dernier point : l'ensemble des propositions de la mécanique ondulatoire forme-t-il un système logique indépendant ? Autrement dit, est-il possible de construire la mécanique ondulatoire au moyen de concepts et de postulats, sans faire appel à aucun moment à l'ancienne mécanique ?

A cette question, on peut sans hésitation répondre par l'affirmative. En effet, les énoncés ci-dessous vont montrer la possibilité d'une construction logique autonome, fondée sur les concepts de *corpuscule*, de *grandeur mécanique*, et de *potentiel*, et sur des postulats qui établissent entre les rapports de ces notions préexistantes une sorte de réglementation que l'expérience a suggérée et confirmée.

Ces énoncés sont l'achèvement du premier stade de l'évolution dont nous avons rapidement tracé les grandes lignes. Ils montrent que, sous cette forme, la mécanique ondulatoire non seulement se trouve bien éloignée de la mécanique classique, mais constitue aujourd'hui une science ayant conquis sa pleine indépendance.

Nous rangerons ces concepts et postulats en quatre groupes :

A. — 1^o Concept *corpuscule*. Aux corpuscules sont attachés des coefficients qui les caractérisent, comme leur « masse » m et leur « charge électrique » e .

2^o *Postulat 1*. — « A chaque corpuscule est attaché un point d'un espace euclidien à trois dimensions qu'on appelle *espace physique* ».

3^o *Définitions*. — a) On appelle *système mécanique* un ensemble d'un nombre fini n de corpuscules.

b) *Espace de configuration*. — A chaque système mécanique composé de N corpuscules on fait correspondre un point M d'un espace à $3N$ dimensions, qu'on appelle espace de configuration. Le point M est tel que, si l'on désigne par x_k, y_k, z_k les coordonnées du point M_k de l'espace physique attaché au k^{e} corpuscule du système, les $3N$ coordonnées $q_1, q_2, q_3, \dots, q_i, \dots, q_{3N-2}, q_{3N-1}, q_{3N}$ du point M de l'espace de configuration sont respectivement $x_1, y_1, z_1, \dots, x_k, y_k, z_k, \dots, x_N, y_N, z_N$. Nous désignerons par D le domaine dans lequel peut se trouver le point M .

B. — 4^o *Concept « grandeur mécanique attachée à un système »*.

5^o *Postulat 2*. — A toute grandeur mécanique correspond un opérateur linéaire formé à partir des variables coordonnées du point figuratif.

6^o *Définitions*. — On appelle « valeur propre » d'un opérateur $\mathbf{A}$ un nombre α tel qu'on ait :

$$\mathbf{A}\varphi_\alpha = \alpha\varphi_\alpha$$

φ_α étant une fonction des variables coordonnées définie dans le domaine D , et soumise aux conditions du postulat 3 ; on l'appelle « fonction propre correspondant à la valeur propre α ». Lorsqu'à une valeur propre α correspondent plusieurs fonctions propres, on dit qu'il y a dégénérescence.

On appelle « spectre » d'un opérateur l'ensemble de ses valeurs propres.

Si le spectre comprend un ensemble continu de valeurs réelles, on découpe l'intervalle dans lequel elles se trouvent en intervalles infiniment étroits Δx_i formant un ensemble dénombrable, et on appelle « différentielle propre » associée à une valeur propre x_j du spectre continu et au nombre Δx_j qui n'est pas nul l'intégrale :

$$\varphi_{\Delta x_j} = \frac{1}{\sqrt{\Delta x_j}} \int_{\Delta x_j} \varphi_\alpha dx,$$

$\Delta\alpha_i$ étant parmi les intervalles définis ci-dessus celui qui comprend la valeur α_j .

7^o *Postulat 3. — Premier principe de quantification.*

Les fonctions propres dans le cas d'un spectre discontinu, et ses différentielles propres dans le cas d'un spectre continu réel, doivent satisfaire aux conditions suivantes :

a) Etre uniformes ;

b) Etre nulles aux limites du domaine D de l'espace de configuration considéré ;

c) Etre de carré sommable.

8^o Ayant imposé aux fonctions propres d'être de carré sommable, les opérateurs mécaniques peuvent être considérés comme des transformations dans l'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable ($\mathfrak{H}_1$) définies dans le domaine D de l'espace de configuration. Nous admettrons alors le postulat ci-dessous :

*Postulat 4. — Un opérateur **A** de la mécanique ondulatoire simple satisfait aux conditions suivantes :*

a) C'est un opérateur linéaire de l'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable ;

b) Il est hermitique ;

c) Il possède un spectre tel que les fonctions propres du spectre discontinu et les différentielles propres du spectre continu forment un système de base complet pour les fonctions de l'espace ($\mathfrak{H}_1$) des variables intéressant l'opérateur **A** dont le domaine de variation est D.

9^o *Postulat 5. — Deuxième principe de quantification, ou principe des valeurs propres.* A un instant t , la valeur d'une grandeur mécanique est nécessairement une des valeurs propres à cet instant de l'opérateur correspondant.

C. 10^o *Postulat 6. — L'état d'un système mécanique est à chaque instant t représenté par une certaine fonction du point figuratif M et du temps, uniforme, nulle aux limites du domaine D, de carré sommable, finie et continue presque*

partout, $\psi(M, t)$ appelée « fonction d'ondes », solution de l'équation :

$$\mathbf{H}\psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

M étant un point de l'espace de configuration, $\mathbf{H}$ l'opérateur appelé « hamiltonien », et h la constante de Planck.

Les seuls points où la fonction ψ peut n'être ni finie ni continue sont ceux : 1° où le potentiel $V(M, t)$ qui entre dans l'opérateur $\mathbf{H}$ est infini ; 2° les points en lesquels il y a une source de corpuscules. En ces points, la fonction ψ ne devra pas satisfaire à l'équation d'ondes ordinaire, mais à l'équation :

$$\mathbf{H}\psi(M, t) - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sum_{P_i} c_i \delta(P_i - M)$$

où P_i sont les points sources, M le point courant, et δ la fonction de Dirac, pour des sources d'intensité $|c_i|^2$. Mais toujours, la fonction ψ devra être de carré sommable.

D. 11° Soient $q_1, q_2, \dots, q_{3N}$ les coordonnées du point figuratif M , et désignons par $q_i \dots q_k$ les variables prises parmi les $q_1 \dots q_{3N}$ qui intéressent l'opérateur $\mathbf{A}$, $\alpha(t)$ ses valeurs propres, et $\varphi(\alpha; q_i \dots q_k; t)$ ses fonctions propres à l'instant t .

Soit $d\tau_2$ le produit de toutes les différentielles dq_l pour les variables qui n'intéressent pas l'opérateur $\mathbf{A}$, et D_1 le domaine de variation de ces variables $q_1 \dots q_n$; soit $\psi(q_1 \dots q_{3N}; t)$ la fonction d'ondes.

Désignons par $\psi_A(q_i \dots q_k; t)$ la fonction obtenue lorsqu'on intègre la fonction d'ondes $\psi(q_1 \dots q_{3N}; t)$ par rapport à toutes les variables qui n'intéressent pas l'opérateur $\mathbf{A}$, l'intégrale étant étendue à l'ensemble des valeurs que peuvent prendre les variables :

$$\psi_A(q_i \dots q_k; t) = \int_{D_1} \psi(q_1 \dots q_{3N}; t) d\tau_2.$$

Les fonctions propres formant un système complet pour les fonctions de carré sommable des variables intéressant $\mathbf{A}$, on peut développer la fonction $\psi_{\mathbf{A}}$ sous la forme :

$$\psi_{\mathbf{A}}(q_i \dots q_k; t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(q_i \dots q_k; t) + \int c(\alpha, t) \varphi(\alpha; q_i \dots q_k; t) d\alpha$$

l'intégrale étant étendue à l'ensemble du spectre continu.

En employant la notation des différentielles propres généralisée que nous avons définie précédemment, on peut écrire :

$$\psi_{\mathbf{A}}(q_i, \dots, q_k; t) = \sum_m c_m(t) \varphi_m(q_i \dots q_k; t).$$

Nous admettons alors le postulat suivant :

Postulat 7 ou Principe de décomposition spectrale. — La probabilité pour qu'une mesure faite à l'instant t fournisse pour la grandeur $\mathbf{A}$ la valeur $\alpha_i(t)$ du spectre discontinu est $c_i(t)c_i^*(t)$ et la probabilité pour que cette mesure fournisse une valeur de $\mathbf{A}$ contenue dans un intervalle $\Delta\alpha$ du spectre continu est :

$$\int_{\Delta\alpha} c(\alpha, t) c^*(\alpha, t) d\alpha.$$

Si l'on emploie la notation généralisée, ce postulat s'exprime en disant que la probabilité pour que la mesure fournisse une valeur de $\mathbf{A}$ dans le m^{e} intervalle $\Delta\alpha_m$ est $c_m(t)c_m^*(t)$.

Dans le cas des opérateurs dégénérés, il y a lieu de faire la somme des carrés des modules des coefficients pour toutes les fonctions correspondant à une même valeur propre.

12° *Définitions.* — a) On appelle « opérateur coordonnée $\mathbf{Q}_j$ » l'opérateur multiplication par la j^{e} coordonnée q_j du point $\mathbf{M}$ de l'espace de configuration :

$$\mathbf{Q}_j = q_j.$$

b) On appelle « opérateur moment conjugué de la coordonnée q_j » l'opérateur $\mathbf{P}_j$:

$$\mathbf{P}_j = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_j}.$$

c) D'après ces définitions, à tout corpuscule ou, ce qui est équivalent, à chacun des points représentatifs M_k de l'espace physique, se trouvent attachés deux opérateurs vectoriels de l'espace physique :

1° L'opérateur $\vec{\mathbf{Q}}_k$ « multiplication par $\overline{\mathbf{OM}}_k$ », dont les composantes seront $x_{k\bullet}$, $y_{k\bullet}$, $z_{k\bullet}$.

2° L'opérateur que nous appellerons « opérateur quantité de mouvement » :

$$\vec{\mathbf{P}}_k = -\frac{h}{2\pi i} \nabla_k$$

dont les composantes seront : $\mathbf{P}_{x_k}$, $\mathbf{P}_{y_k}$, $\mathbf{P}_{z_k}$.

d) On voit aussi qu'au point figuratif se trouvent attachés deux opérateurs vectoriels :

1° L'opérateur coordonnée $\vec{\mathbf{Q}}$ dont les composantes sont les 3 N opérateurs $\mathbf{Q}_k$.

2° L'opérateur quantité de mouvement $\mathbf{P}$ dont les composantes sont les 3 N opérateurs $\mathbf{P}_{x_k}$. Nous écrirons :

$$\vec{\mathbf{P}} = \frac{h}{2\pi i} \nabla.$$

e) Les autres opérateurs utilisés sont des fonctions des opérateurs $\mathbf{Q}_i$ et $\mathbf{P}_j$; parmi eux citons : 1° l'opérateur répartition $\mathbf{R}$ qui est le produit de tous les opérateurs $\mathbf{Q}_i$;

2° Les opérateurs composantes du « moment de rotation du k^e corpuscule », ce moment étant l'opérateur vectoriel :

$$\mathfrak{M}_o^t \vec{\mathbf{P}}_k = \overline{\mathbf{OM}}_{(k)} \wedge \vec{\mathbf{P}}_{(k)}.$$

13° Concept « potentiel » $V(M, t)$. — Le potentiel est une

fonction du point M de l'espace de configuration, nulle à l'infini, et telle que le produit $V(M, t) \psi(M, t)$ soit une fonction de carré sommable.

14° *Postulat 8.* — L'opérateur H de l'équation d'ondes est :

$$H = \sum_{k=1}^N \frac{1}{2m_k} \vec{P}_k^2 + V(M, t).$$

N étant le nombre de corpuscules du système, m_k la masse du k^{e} , $\vec{P}_k$ l'opérateur quantité de mouvement qui lui est attaché, $V(M, t)$ le potentiel.

On démontrerait facilement que ces divers postulats sont compatibles et indépendants les uns des autres.

Dans ces quatorze paragraphes, se trouve énoncé tout ce qui permet de développer la mécanique ondulatoire non relativiste à laquelle nous avons été conduit en suivant les idées introduites principalement par Louis de Broglie, Born, Schrödinger, Heisenberg, Jordan, Weyl, Dirac. Nous ne pousserons pas plus avant les développements de cette mécanique à laquelle nous donnerons par la suite la dénomination de « Mécanique Ondulatoire simple ». En effet, nous entendons nous limiter à la recherche des principes et au rôle des opérateurs que nous nous sommes efforcé de bien préciser.

CHAPITRE II

Principes de la mécanique de Pauli.

1. Spin de l'électron. — La Mécanique ondulatoire simple dont nous venons de rappeler les grandes lignes ne tient pas compte de deux phénomènes : 1^o du « spin » ou moment de rotation de l'électron sur lui-même ; 2^o des corrections de relativité.

Pauli ⁽⁸⁾ fut le premier à proposer une théorie non relativiste de l'électron magnétique, que nous allons maintenant examiner en soulignant le perfectionnement qu'elle apporte. Nous nous bornerons toutefois au cas d'un corpuscule unique, car on ne sait pas encore exactement quelles interactions produit, entre des corpuscules, l'existence des spins. Une fois cette question résolue, la théorie s'étendra aisément au cas des systèmes.

Pour expliquer certains phénomènes, et particulièrement la structure fine des spectres, Uhlenbeck et Goudsmit ont été amenés à supposer que l'électron possédait l'analogue d'un moment de rotation, qu'on a dénommé « spin », correspondant à une rotation de l'électron sur lui-même. Mais le spin est essentiellement différent des moments de rotation de la mécanique classique où ils sont représentés par des vecteurs ayant une projection définie sur chaque axe ; au contraire, le spin a toujours comme projection sur un axe quelconque, soit $+\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$ soit $-\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$: il est donc d'une nature spécifiquement quantique. Par la suite on a été amené à admettre que le proton avait, lui aussi, un spin égal à celui de l'élec-

tron, et plus généralement, que certains noyaux atomiques en possédaient. A un moment de rotation interne du corpuscule correspond alors un moment magnétique interne qui est

$$\pm \frac{eh}{4\pi m_0 c}.$$

2. Idée fondamentale de Pauli. — Pour tenir compte du spin, nous devons attacher à un corpuscule, électron par exemple, non seulement un point M de l'espace à trois dimensions, mais en plus un certain indice ζ qui servira à caractériser le spin, c'est-à-dire à indiquer s'il est égal à $+\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$ ou à $-\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$. Comme le spin peut prendre deux valeurs, il suffit pour le repérer que l'indice ζ prenne deux valeurs, c'est-à-dire que nous considérions deux fonctions ψ_1 et ψ_2 du point M de l'espace x, y, z et du temps. Ceci constitue une sorte de polarisation de l'onde ψ : c'est l'emploi de ces deux fonctions ψ_1 et ψ_2 qui est l'idée fondamentale de Pauli.

Au lieu des deux fonctions ψ_1 et ψ_2 , il serait plus simple de n'avoir à considérer qu'un seul élément ; deux idées se présentent immédiatement à l'esprit : d'abord, considérer une fonction $\psi(x, y, z, \zeta, t)$ dans laquelle la variable ζ pourra prendre les valeurs 1 et 2 : ψ_1 et ψ_2 correspondraient donc aux deux valeurs de la variable ζ qu'on a appelée « variable de spin ». La deuxième idée serait de considérer un vecteur $\vec{\psi}$ dont les deux composantes seraient ψ_1 et ψ_2 qui traduiraient l'idée d'une polarisation. Nous allons examiner ces deux hypothèses, et montrer que l'idée d'une variable de spin est inadéquate, et que c'est au contraire la considération de ψ comme un vecteur à deux composantes dans un espace de Hilbert qui représente bien les faits physiques.

Pour développer la mécanique de Pauli, il faut y transposer les principes de la mécanique ondulatoire simple. C'est ainsi par exemple que le principe des interférences nous con-

duit à admettre que la probabilité de présence dans un élément de volume $d\tau$ avec le signe $+$ pour la composante du spin suivant un certain axe $\vec{ou}$ sera $\psi_1\psi_1^*d\tau$; avec le signe $-$ elle sera : $\psi_2\psi_2^*d\tau$. Si l'on ne précise pas le signe, de la composante du spin, elle sera $(\psi_1\psi_1^* + \psi_2\psi_2^*)d\tau$ si l'onde ψ est normée.

D'autre part, la condition de normalisation, d'après l'expression de la probabilité de présence et le théorème de la probabilité totale devra être :

$$N(\psi) \equiv \int \int \int_D (\psi_1\psi_1^* + \psi_2\psi_2^*) d\tau = 1.$$

Cette condition de normalisation s'accorderait bien avec la notion de variable de spin ζ . En effet, il semble que nous pouvons considérer une variable ξ telle que $\zeta = 1$ si $0 < \xi \leq 1$; $\zeta = 2$, si $1 < \xi \leq 2$; ζ est alors une fonction de ξ , et en intégrant la fonction $\psi(x, y, z, \zeta, t)$ suivant les valeurs de ξ entre 0 et 2, nous aurons comme condition de normalisation :

$$\int \int \int \int \psi(x, y, z, \zeta, t) \cdot \psi^*(x, y, z, \zeta, t) d\tau_4 = 1$$

$d\tau_4$ étant l'élément de volume de l'espace x, y, z, ξ qui jouerait alors le rôle d'espace de configuration :

$$d\tau_4 = dx \cdot dy \cdot dz \cdot d\xi.$$

3. Equation d'ondes. — Que nous considérions ψ , soit comme une fonction de la variable ζ , soit comme un vecteur, nous devons obtenir une équation d'ondes à laquelle devra satisfaire l'élément ψ . Cette équation devra être telle que la norme de ψ , soit $N(\psi)$, définie plus haut, reste constamment égale à 1. Pour la trouver, Pauli a suivi le guide formel qui a réussi dans la mécanique où l'on, ne tenait pas compte du spin. Il fait correspondre à la fonction hamiltonienne classique un opérateur $\mathbf{H}$ qui opérera sur x, y, z et

l'indice ζ . Il prend comme équation d'ondes l'équation formelle que nous avons déjà eue en mécanique ondulatoire simple :

$$\mathbf{H}\psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Pour obtenir l'opérateur $\mathbf{H}$, Pauli est parti de la fonction hamiltonienne classique. A un moment de rotation d'une charge électrique correspond un moment magnétique qui, si on désigne par $\vec{s}$ le vecteur unité de l'axe de rotation est $\frac{eh}{4\pi m_0 c} \vec{s}$. Soient s_x, s_y, s_z , les composantes de $\vec{s}$; étant donné que l'énergie magnétique est égale au produit scalaire du vecteur moment magnétique par le champ magnétique extérieur, la fonction hamiltonienne est une fonction linéaire de s_x, s_y, s_z , soit :

$$\mathcal{H}(x, y, z; t; p_x, p_y, p_z; s_x, s_y, s_z).$$

Pour passer de la fonction hamiltonienne à l'opérateur que nous sommes habitué à faire correspondre en mécanique ondulatoire, il est naturel de remplacer chaque coordonnée par l'opérateur multiplication par la coordonnée considérée, et les p par les $\mathbf{P}$, c'est-à-dire x par x ., p_x par $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}$ et de même pour les autres.

Pour s_x, s_y, s_z nous devons, par analogie avec la quantité de mouvement $\vec{\mathbf{P}}$, les remplacer par des opérateurs $\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_y, \mathbf{S}_z$ qu'on peut regarder comme les composantes sur les trois axes d'un opérateur vectoriel $\vec{\mathbf{S}}$. Ainsi se trouvent introduits des opérateurs d'un genre nouveau qui vont opérer, non sur les variables x, y, z mais sur l'indice ζ et qui sont attachés au spin.

4. Opérateurs $\mathbf{S}$ de Pauli. — Supposons qu'on cherche à mesurer la composante du spin suivant un axe, par exemple $\vec{o}z$. On peut trouver comme valeur, soit $+\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$ soit

$-\frac{1}{2} \frac{h}{2\pi}$; donc d'après le principe de quantification, l'opérateur $\mathbf{S}_z$, et de même les opérateurs $\mathbf{S}_x$ et $\mathbf{S}_y$, ne devront avoir que deux valeurs propres $+1$ et -1 , donc au moins deux fonctions propres, ψ_+ et ψ_- .

Si on développe l'élément ψ dans le système des fonctions propres d'un opérateur $\mathbf{S}_i$ on aura :

$$\psi = \sum a_{i+} \psi_+ + \sum a_{i-} \psi_-.$$

Mais au début, nous sommes parti de l'idée que les fonctions ψ_1 et ψ_2 devaient indiquer dans quel sens le spin était dirigé. Il suffit donc d'avoir un seul élément ψ_+ et un seul ψ_- que nous identifierons respectivement avec ψ_1 et ψ_2 , de sorte que nous aurons simplement :

$$\psi = a_+ \psi_1 + a_- \psi_2.$$

Si on applique un opérateur $\mathbf{S}_i$ à un élément ψ , on devra obtenir un élément de même type, soit $\varphi^{(i)}$.

$$\varphi^{(i)} = \mathbf{S}_i \psi.$$

L'opérateur $\mathbf{S}_i$ sera bien défini si pour chacune des valeurs de l'indice ζ , connaissant l'élément ψ , on connaît l'élément $\varphi^{(i)}$.

C'est maintenant que l'idée de considérer ζ comme une variable se montrerait le plus utile. Adoptons pour un instant cette manière de raisonner. Une fonction étant définie par l'ensemble de ses valeurs, la fonction $\varphi^{(i)}$ se trouve être une fonction de toutes les valeurs ψ . D'autre part, il est naturel de supposer que l'opérateur $\mathbf{S}_i$ est linéaire, comme tous les opérateurs que nous avons rencontrés en mécanique ondulatoire. Considérons alors les fonctions ψ_1 et ψ_2 définies par :

ζ	1	2
ψ_1	$\psi_1 (1)$	0
ψ_2	0	$\psi_1 (2)$

On a :

$$\psi = \psi_1 + \psi_2$$

donc :

$$\varphi^{(i)} = \mathbf{S}_i \psi = \mathbf{S}_i \psi_1 + \mathbf{S}_i \psi_2.$$

Il est également naturel de supposer que :

$$\mathbf{S}_i \mathbf{0} = \mathbf{0}.$$

Dès lors, on a :

$$\begin{aligned} \varphi^{(i)}(1) &= s_{11} \psi_1 + s_{12} \psi_2 \\ \varphi^{(i)}(2) &= s_{21} \psi_1 + s_{22} \psi_2 \end{aligned}$$

ce qui détermine la fonction $\varphi^{(i)}(\zeta)$ et démontre qu'on peut associer à l'opérateur $\mathbf{S}_i$ une matrice S_i :

$$S_i = \begin{vmatrix} s_{11}^{(i)} & s_{12}^{(i)} \\ s_{21}^{(i)} & s_{22}^{(i)} \end{vmatrix}$$

qui définit complètement l'opérateur $\mathbf{S}_i$.

Si au contraire on considère $\varphi^{(i)}$ et ψ comme des vecteurs à deux composantes, que nous désignerons par $\overleftarrow{\varphi^{(i)}}$ et $\overleftarrow{\psi}$ l'opérateur $\mathbf{S}_i$ auquel nous venons d'être conduit en considérant ζ comme une variable apparaît comme une transformation linéaire du vecteur $\overleftarrow{\psi}$ en $\overleftarrow{\varphi^{(i)}}$. Nous avons supposé *a priori* que $\mathbf{S}_i$ ne pouvait opérer que sur l'indice, et supposé d'autre part qu'il était un opérateur linéaire; il s'ensuit qu'il définit une transformation linéaire de vecteurs, et on retrouve le même résultat. Mais comme en mécanique ondulatoire simple les opérateurs opéraient sur les arguments de la fonction ψ , le premier raisonnement avec ζ nous semble toutefois plus naturel pour parvenir à définir les matrices S_i .

Un opérateur de la forme :

$$\Omega = \sum_i \mathbf{A}_i \mathbf{S}_i \mathbf{B}_i$$

les $\mathbf{A}_i$ et $\mathbf{B}_i$ étant des opérateurs ne portant pas sur ζ , c'est-à-dire des opérateurs du genre de ceux que nous avons rencontrés en mécanique ondulatoire simple, signifie que si l'on veut calculer la fonction φ définie par :

$$\varphi = \Omega \psi$$

on doit d'abord appliquer à ψ les $\mathbf{B}_i$; on obtient ainsi des fonctions $\psi^{(i)}$; puis on leur applique les opérateurs $\mathbf{S}_i$. Ceux-ci pouvant être représentés par des matrices, si $\chi^{(i)}$ est le résultat de l'opération, on aura :

$$\begin{aligned}\chi_1^{(i)} &= s_{11}^{(i),1} \psi_1^{(i)} + s_{12}^{(i),1} \psi_2^{(i)} \\ \chi_2^{(i)} &= s_{21}^{(i),1} \psi_1^{(i)} + s_{22}^{(i),1} \psi_2^{(i)}\end{aligned}$$

Enfin on applique les opérateurs $\mathbf{A}_i$ aux fonctions $\chi^{(i)}$, ce qui donne les fonctions $\varphi^{(i)}$

$$\varphi^{(i)} = \mathbf{A}_i \chi^{(i)}$$

les $\varphi^{(i)}$ dépendent de l'indice ζ et sont définies par :

$$\varphi_1^{(i)} = \mathbf{A}_i \chi_1^{(i)} \quad \varphi_2^{(i)} = \mathbf{A}_i \chi_2^{(i)}$$

puisque, par hypothèse, les $\mathbf{A}_i$ n'opèrent pas sur ζ .

Enfin, on obtiendra φ par sommation. φ pourra être considérée soit comme une fonction de ζ , soit comme un vecteur à deux composantes. Dans les deux hypothèses, on aura :

$$\varphi = \sum_i \mathbf{A}_i \chi_i^{(i)} \quad \varphi_2 = \sum_i \mathbf{A}_i \chi_2^{(i)}.$$

Si on avait un opérateur formé par un polynôme, on pourrait le considérer comme provenant de produits et de sommes d'opérateurs du type de Ω , et il suffirait d'appliquer ce raisonnement un nombre suffisant de fois, par exemple, pour un opérateur $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_i$ on retrouverait la règle du produit de deux matrices pour obtenir la matrice correspondant à cet opérateur.

Si on a une équation du type :

$$\Omega_{\uparrow}^{\downarrow} = \mathbf{K}_{\uparrow}^{\downarrow},$$

$\mathbf{K}$ étant un opérateur n'intéressant pas ζ , l'équation se séparera en deux équations ne contenant plus ζ :

$$\sum \mathbf{A}_i [s_{11}^{(i)} \mathbf{B}_{i\uparrow 1}^{\downarrow} + s_{12}^{(i)} \mathbf{B}_{i\uparrow 2}^{\downarrow}] = \mathbf{K}_{\uparrow 1}^{\downarrow}$$

$$\sum \mathbf{A}_i [s_{21}^{(i)} \mathbf{B}_{i\uparrow 1}^{\downarrow} + s_{22}^{(i)} \mathbf{B}_{i\uparrow 2}^{\downarrow}] = \mathbf{K}_{\uparrow 2}^{\downarrow}.$$

L'opérateur $\mathbf{H}$ qu'on obtient à partir de la fonction hamiltonienne classique par le changement de x en $\mathbf{Q}_x$, de p en $\mathbf{P}$, de s en $\mathbf{S}$, est du type de Ω , et l'équation d'ondes est du type ci-dessus. En effet la fonction $\mathcal{H}$ est :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + eU + \frac{eh}{4\pi m_0 c} \vec{\mathbf{H}} \cdot \vec{s}$$

$\vec{\mathbf{H}}$ étant le champ magnétique extérieur, U le potentiel électrostatique ; d'où l'opérateur $\mathbf{H}$ correspondant :

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \vec{\mathbf{P}}^2 + eU + \frac{eh}{4\pi m_0 c} \vec{\mathbf{H}} \cdot \vec{\mathbf{S}}.$$

Les opérateurs $\mathbf{S}_i$ correspondant à des moments de rotation interne doivent obéir, selon Pauli, aux relations de commutation des moments de rotation habituels, c'est-à-dire que, en vertu du spin égal à $\frac{h}{4\pi}$, on a :

$$\mathbf{S}_z \mathbf{S}_x - \mathbf{S}_x \mathbf{S}_z = 2i \mathbf{S}_y$$

ainsi que les deux autres relations obtenues en permutant circulairement les indices.

Pour les matrices $\mathbf{S}_i$ qui définissent l'opérateur $\vec{\mathbf{S}}$, Pauli a posé dans le cas où l'on cherche la probabilité pour que la composante dirigée suivant $\vec{o z}$ du spin soit $+\frac{h}{4\pi}$ ou $-\frac{h}{4\pi}$:

$$\mathbf{s}_1 = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \quad \mathbf{s}_2 = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{vmatrix} \quad \mathbf{s}_3 = \begin{vmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$$

qui donnent bien pour valeurs propres $+1$ et -1 .

On vérifie alors facilement que la norme $N(\psi)$ est bien conservée au cours du temps.

5. Probabilité des valeurs du spin suivant un axe quelconque. — Dans le cas où l'on cherche les probabilités du spin suivant un axe quelconque $\vec{ou}$, en vertu des propriétés d'homogénéité de l'espace, il suffira de faire un changement de coordonnées et de prendre cet axe comme nouvel axe oz . On pourra faire tout simplement une rotation d'un angle $\theta = (\vec{oz}, \vec{ou})$ autour de l'axe perpendiculaire au plan zou . Cette rotation doit donner le même résultat qu'une rotation d'un angle $-\theta$ amenant $\vec{ou}$ sur $\vec{oz}$ et le champ $\vec{H}$ dans une autre direction. Ainsi la seule modification que subira l'équation d'ondes dans ce cas sera que les composantes du champ magnétique auront changé.

Adoptons alors pour un instant l'hypothèse que ψ est une fonction de l'indice ζ . On voit que la nouvelle fonction d'ondes $\psi'(x', y', z', \zeta, t)$ ne sera pas la fonction $\psi(x, y, z, \zeta, t)$ du cas précédent, dans laquelle on aura remplacé x par x' , y par y' , z par z' , car le terme $\vec{H} \cdot \vec{S}$ de l'hamiltonien, au lieu d'être $\sum_i H_i S_i$ sera ici $\sum_{ik} a_{ik} H_k S_i$, les a_{ik} définissant les

nouvelles composantes de $\vec{H}$ après la rotation d'angle θ .

Revenons au premier système de coordonnées x, y, z . Soit $\psi'(x, y, z, \zeta, t)$ la fonction d'ondes correspondant à l'axe $\vec{ou}$. On voit qu'elle diffère de $\psi(x, y, z, \zeta, t)$. On ne peut donc pas considérer ψ comme une fonction de point de l'espace à quatre dimensions x, y, z, ζ pas plus que $\psi_1(x, y, z, t)$ et $\psi_2(x, y, z, t)$ ne sont des fonctions de points

de l'espace physique. Ceci provient de ce que les matrices représentant l'opérateur $\vec{S}$ dans un certain système de référence x, y, z , ne sont pas liées uniquement aux corpuscules, mais en outre à la direction le long de laquelle on mesure le spin. La fonction ψ dépend donc encore de variables qui servent à caractériser l'axe $\vec{ou}$. Une seule suffit : à savoir θ angle de $\vec{ou}$ et de $\vec{oz}$, car les probabilités doivent être invariantes lors d'une rotation autour de $\vec{ou}$. Le fait qu'on ne puisse considérer $\psi(x, y, z, \zeta, t)$ comme une fonction de point dans l'espace x, y, z, ζ conduit à rejeter l'hypothèse suivant laquelle ζ joue le rôle d'une variable dans la fonction ψ .

Au contraire, Pauli a démontré que ψ' était lié à ψ par les relations suivantes :

$$\begin{aligned}\psi'_1 &= u_{11}\psi_1 + u_{12}\psi_2 \\ \psi'_2 &= u_{21}\psi_1 + u_{22}\psi_2\end{aligned}$$

les u_{ij} étant les éléments d'une matrice unitaire à deux lignes et deux colonnes qui dépendent de l'angle θ . Ces relations conduisent à la seconde idée suivant laquelle ψ doit être considéré comme un vecteur ayant deux composantes ψ_1 et ψ_2 . Le fait que la matrice u_{ij} est unitaire entraîne l'invariance de $\psi_1\psi_1^* + \psi_2\psi_2^*$ lorsque la transformation qu'elle définit est appliquée à ψ .

6. Espace (ψ_2). — D'après ce qui précède, on voit que l'on doit considérer ψ comme un vecteur ayant deux composantes ψ_1 et ψ_2 . Pour ne pas confondre avec les vecteurs de l'espace physique, nous mettrons la flèche en sens inverse : $\overleftarrow{\psi}$. Les composantes ψ_1 et ψ_2 sont des éléments de l'espace de Hilbert ($\mathfrak{H}_1$). En effet, $\int(\psi_1\psi_1^* + \psi_2\psi_2^*) d\tau$ est constamment égal à l'unité, ce qui implique que ψ_1 et ψ_2 sont de carré sommable. Le principe de décomposition spectrale se trans-

pose ici en disant que si C_{ii} et C_{ji} sont des composantes du développement des fonctions ψ_i et ψ_j dans le système de base des fonctions propres et différentielles propres d'un opérateur mécanique, la probabilité pour que le corpuscule soit dans l'état j avec le signe $+$ pour la composante du spin suivant l'axe $\vec{ou}$, est $c_{ij} \cdot c_{ij}^*$. Avec le signe $-$, elle sera $c_{ij}c_{ij}^*$, et si l'on ne tient pas compte du signe, elle sera $c_{ij} \cdot c_{ij}^* + c_{ji}c_{ji}^*$.

Ce principe conduit à dire que deux vecteurs $\overleftarrow{\psi}$ et $\overleftarrow{\varphi}$ sont infiniment voisins si toutes les composantes pour φ_1 et ψ_1 , φ_2 et ψ_2 sont infiniment voisines en module.

Comme en mécanique ondulatoire simple, ce principe de décomposition spectrale conduit à définir le voisinage au moyen d'une distance, en posant :

distance

$$\{\overleftarrow{\varphi}, \overleftarrow{\psi}\} = \sqrt{\sum_i (a_{ii} - c_{ii})(a_{ii}^* - c_{ii}^* + (a_{ii} - c_{ii}^*)(a_{ii}^* - c_{ii}^*))}$$

ψ_1 et ψ_2 étant des éléments de l'espace $(\mathfrak{H}_1)$. On peut encore écrire cette distance sous la forme :

distance

$$\{\overleftarrow{\varphi}, \overleftarrow{\psi}\} = \sqrt{\int_D [(\varphi_1 - \psi_1)(\varphi_1^* - \psi_1^*) + (\varphi_2 - \psi_2)(\psi_2^* - \varphi_2^*)] d\tau.}$$

Mais en définissant ainsi la distance de deux vecteurs, nous tombons sur un espace connu. En effet, si l'on se reporte à l'ouvrage de Stone ⁽⁹⁾, on y trouve, mais avec d'autres notations, le théorème suivant :

« La classe des vecteurs $\overleftarrow{\psi}$ à m composantes $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_m$ telles que chacune soit un élément d'un espace de Hilbert, constitue un espace de Hilbert si l'on définit l'addition, la multiplication par un nombre, l'élément zéro et le produit scalaire comme suit :

1° $\overleftarrow{\chi} = \overleftarrow{\varphi} + \overleftarrow{\psi}$ est le vecteur de composantes $\varphi_k + \psi_k$;

2° $a\overleftarrow{\psi}$ est le vecteur de composantes $a\psi_k$;

3° L'élément 0 est le vecteur dont toutes les composantes sont zéro,

4° Le produit scalaire de deux vecteurs $\overleftarrow{\varphi}, \overleftarrow{\psi}$ est la somme des produits scalaires des composantes de même rang :

$$(\overleftarrow{\varphi}, \overleftarrow{\psi}) = (\varphi_1, \psi_1) + \dots + (\varphi_m, \psi_m) \text{ »}.$$

Nous désignerons par (ψ_m) un tel espace lorsque les composantes des vecteurs seront des éléments de l'espace $(\mathfrak{H}_1)$ des fonctions de carré sommable.

On voit que les $\overleftarrow{\psi}$ de la théorie de Pauli sont des vecteurs à deux composantes ψ_1 et ψ_2 , éléments de l'espace $(\mathfrak{H}_1)$. L'espace des $\overleftarrow{\psi}$ de Pauli est donc (ψ_2) .

Il faut bien remarquer que le vecteur $\overleftarrow{\psi}$ a un sens intrinsèque : il est fonction du point figuratif M, mais non de l'axe $\overrightarrow{ou}$. L'onde $\overleftarrow{\psi}$ est donc une fonction de points de l'espace physique qui a une sorte de polarisation, et les deux composantes ψ_1, ψ_2 dépendent de l'axe $\overrightarrow{ou}$ le long duquel on cherche les valeurs du spin. Soulignons aussi combien cette polarisation est différente de celle d'une onde lumineuse, car si $\overrightarrow{X}$ est le vecteur lumineux de Fresnel, ses composantes X_1, X_2, X_3 traduisent la polarisation, mais $\overrightarrow{X}$ est un vecteur de l'espace physique. Ici au contraire, $\overleftarrow{\psi}$ est un vecteur à deux composantes qui appartient à un espace de Hilbert.

Un autre théorème, qu'on trouvera dans le même ouvrage de Stone ⁽¹²⁾, dit que la condition pour que **T** soit une transformation dans l'espace (ψ_m) est qu'il existe m^2 transformations **T**_{*ik*} avec *i, k* = 1, ..., *m* de l'espace $(\mathfrak{H}_1)$ telles que si **T** change un vecteur $\overleftarrow{\varphi}$ en un vecteur $\overleftarrow{\psi}$, on ait :

$$\psi_i = \sum_{k=1}^m \mathbf{T}_{ik} \varphi_k \quad i = 1, \dots, m$$

ce qu'on écrit simplement sous la forme :

$$\overleftarrow{\varphi} = \mathbf{T} \overleftarrow{\psi}.$$

On a dans la théorie de Pauli, comme opérateurs mécaniques, d'une part les mêmes opérateurs qu'en mécanique ondulatoire simple que nous avons rangés en six classes. Si $\mathbf{A}$ est l'un d'eux, on posera :

$$\mathbf{A}_{ij} = \mathbf{A} \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2$$

La matrice ainsi obtenue définit l'opérateur $\mathbf{A}$ de l'espace (ψ_2) .

D'autre part, on a une septième classe d'opérateurs mécaniques : les opérateurs $\mathbf{S}$. Ils définissent une transformation linéaire des composantes des vecteurs : les éléments s_{ij} de la matrice associée sont des nombres. Les s_{ij} dépendent de l'axe $\vec{ou}$ c'est-à-dire de l'angle $\theta = (\vec{oz}, \vec{ou})$. C'est là où s'introduit l'influence du choix de l'axe le long duquel on cherche la composante du spin. On constate que les matrices s_{ij} sont hermitiques. Nous avons indiqué plus haut l'expression de ces matrices lorsque θ est nul.

Si l'on a un opérateur produit d'un opérateur de l'une des six premières classes et d'un de la septième, ce que nous appellerons « opérateur de la huitième classe », on lui associera une matrice correspondant au produit des deux matrices. Par exemple, soit l'opérateur $\mathbf{AS}$, on aura :

$$(\mathbf{AS})_{ij} = \sum_k \mathbf{A} \delta_{ik} s_{kj} = \mathbf{A} s_{ij} \quad i, j, k = 1, 2.$$

On voit qu'il y a commutation : $\mathbf{AS} = \mathbf{SA}$.

Enfin nous aurons, comme en mécanique ondulatoire simple, à utiliser les opérateurs isométriques et unitaires qui ne correspondent à aucune grandeur physique, et qui ont pour propriété de conserver la norme $N(\psi) = \int (\psi_1 \psi_1^* + \psi_2 \psi_2^*) d\tau$. Pour les mêmes raisons qu'en mécanique ondulatoire sim-

ple, c'est l'espace (ψ_2) entier qu'il faut considérer, et non pas un sous-ensemble.

Les opérateurs mécaniques de la théorie de Pauli sont des transformations dans l'espace (ψ_2) et satisfont aux cinq mêmes conditions que les opérateurs de la mécanique ondulatoire simple.

7. Concepts et postulats de la mécanique de Pauli. — La mécanique de Pauli forme, elle aussi, un système logique indépendant, et peut être construite au moyen de concepts et postulats. Il suffit pour les obtenir de transposer ceux de la mécanique ondulatoire simple.

En effet, pour obtenir sa mécanique, Pauli a cherché à apporter le moins de modifications possible à la mécanique ondulatoire. Il a gardé le procédé formel habituel pour obtenir l'équation d'ondes. Mais cette fois, à l'encontre du cas de la mécanique ondulatoire simple des systèmes, nous ne pouvons pas faire de contrôle par le passage à l'optique géométrique, car c'est un phénomène essentiellement quantique qui a fait modifier la théorie ondulatoire simple.

C'est donc par un raisonnement, cette fois d'analogie purement formelle, que Pauli a obtenu son équation d'ondes : à partir de maintenant, c'est uniquement par des raisonnements de ce genre qu'ont été trouvées les nouvelles théories quantiques. On aura toujours l'équation d'ondes :

$$\mathbf{H}\psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

qui est le dogme fondamental de toutes ces théories. Pour définir complètement l'équation, il faudra donner : 1^o les arguments de la fonction ψ et le domaine de variation de ces arguments ou, si l'on préfère, les coordonnées du point M de l'espace de configuration dans lequel se propage l'onde ψ et le domaine où peut se trouver M ; 2^o l'opérateur $\mathbf{H}$; 3^o les conditions auxquelles ψ doit satisfaire, c'est-à-dire définir l'espace des fonctions ψ .

A chaque théorie correspond un espace de configuration, un opérateur $\mathbf{H}$, un espace de fonctions d'ondes.

Pour cette mécanique, les changements aux postulats de la mécanique ondulatoire simple proviennent du changement d'hamiltonien et du changement d'espace des fonctions d'ondes. Comme précédemment, nous rangerons les concepts et postulats en quatre groupes :

A. — Ceux du groupe A sont sans changement. Toutefois ici, nous nous bornerons comme nous l'avions dit au début, au cas d'un seul corpuscule.

B. — Ceux du groupe B sont encore les mêmes, seulement ici les fonctions propres φ_x ne sont pas des fonctions mais des vecteurs $\overleftarrow{\psi}_x$ de l'espace (ψ_2) . Ensuite, dans le postulat 3 la condition c) doit être remplacée par la suivante : « Les fonctions propres ou différentielles propres sont des éléments de l'espace (ψ_2) », de même pour la condition a) du postulat 4 : « un opérateur mécanique appartient à l'espace (ψ_2) ».

C. — 10° *Postulat 6*. — « L'état d'un corpuscule est à chaque instant t représenté par un certain vecteur de l'espace (ψ_2) , fonction du point figuratif M et du temps $\overleftarrow{\psi}(M, t)$ appelé « fonction d'ondes », dont les deux composantes ψ_1 et ψ_2 satisfont aux mêmes conditions que les fonctions ψ de la mécanique ondulatoire simple, et qui est solution de l'équation

$$\mathbf{H}\overleftarrow{\psi} = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \overleftarrow{\psi}}{\partial t} .$$

D. — 11° Le principe de décomposition spectrale doit être modifié comme suit. en prenant la notation des différentielles propres généralisées : « La probabilité pour qu'une mesure faite à l'instant t fournisse une valeur de la grandeur A dans le m^e intervalle Δx_m avec le signe $+$ pour la composante du spin est $c_{1m}(t) \cdot c_{1m}^*(t)$ et avec le signe $-$ elle est $c_{2m}(t) \cdot c_{2m}^*(t)$.

Si l'on ne précise pas le signe, elle est :

$$c_{1m}(t) \cdot \dot{c}_{1m}(t) + c_{2m}(t) \cdot \dot{c}_{2m}(t).$$

12° Dans les définitions d'opérateurs, on doit ajouter :

f) En plus des opérateurs fonction de $\mathbf{P}$ et de $\mathbf{Q}$, il existe trois opérateurs $\mathbf{S}_x$, $\mathbf{S}_y$, $\mathbf{S}_z$ qui définissent des transformations linéaires des composantes des vecteurs de l'espace (ψ_2) et sont définis par des matrices à deux lignes et deux colonnes dépendant de l'angle θ que fait l'axe $\vec{oz}$ avec l'axe $\vec{ou}$ le long duquel on cherche les composantes du spin. Ils possèdent deux valeurs propres $+1$ et -1 qui indiquent si la composante le long de $\vec{ou}$ a le signe $+$ ou le signe $-$.

14° *Postulat 8.* — L'opérateur $\mathbf{H}$ de l'équation d'en les e t :

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \vec{\mathbf{P}}^2 + eU + \frac{eh}{4\pi m_0 c} \vec{\mathbf{H}} \cdot \vec{\mathbf{S}}.$$

U étant le potentiel électrostatique, $\vec{\mathbf{H}}$ le champ magnétique extérieur, e la charge électrique du corpuscule, m_0 sa masse.

Ces quatorze paragraphes contiennent, sous une forme logique, l'ensemble des énoncés qui servent de base à la mécanique de Pauli. Cette théorie a ouvert la voie à Dirac en montrant que l'introduction du spin conduit à considérer plusieurs fonctions d'ondes se propageant dans l'espace habituel ou, pour mieux dire, un $\overleftarrow{\psi}$ qui est un vecteur à plusieurs composantes dans un espace de Hilbert. En effet, comme nous l'avons indiqué plus haut, ce sont bien l'espace à trois dimensions et le vecteur $\overleftarrow{\psi}$ qui conviennent, et non pas l'espace de configuration à quatre dimensions x, y, z, ζ et une fonction $\psi(x, y, z, \zeta, t)$: il est donc préférable de ne pas employer une variable de spin.

CHAPITRE III

Principes de la mécanique de Dirac.

1. Recherche d'une Mécanique Ondulatoire relativiste. —

La mécanique de Pauli nous a permis d'introduire la notion de « spin », mais a négligé les corrections de la relativité. Dirac a obtenu une mécanique qui tient compte à la fois du spin et des corrections de relativité et qui, lorsqu'on s'en tient à l'approximation newtonienne, redonne la théorie de Pauli.

2. **Théorie de Dirac.** — Dirac⁽¹¹⁾ déclara 1^o que l'équation d'ondes devait être du premier ordre en t : c'est-à-dire que nous devions encore avoir l'équation formelle :

$$\mathbf{H}\psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

l'opérateur $\mathbf{H}$ étant linéaire et ne contenant pas $\frac{\partial}{\partial t}$, de même que dans les deux théories que nous avons étudiées précédemment; 2^o qu'elle devait présenter l'invariance relativiste, c'est-à-dire que si l'on changeait x, y, z, t en x', y', z', t' par une transformation de Lorentz, on devrait obtenir une équation de même forme :

$$\mathbf{H}'\psi' = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi'}{\partial t'} .$$

3^o l'obligation de tenir compte du spin doit, comme dans la théorie de Pauli, faire intervenir plusieurs fonctions des quatre variables x, y, z, t qui, comme nous le verrons,

pourront être considérées comme les composantes d'un vecteur $\overleftarrow{\psi}$ d'un espace (ψ_m) . 4° Le principe des interférences doit encore s'appliquer, et la norme de ψ se conserver, son expression ayant la même forme que dans la théorie de Pauli, c'est-à-dire que :

$$N(\psi) = \int \left(\sum_k \psi_k \psi_k^* \right) d\tau.$$

5° Par suite de la symétrie relativiste, l'équation étant du premier ordre en t , devra être du premier ordre par rapport à x, y, z , donc l'opérateur $\mathbf{H}$ sera une fonction linéaire de $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$. Dirac s'est trouvé conduit à introduire encore comme opérateurs correspondant aux composantes de la quantité de mouvement suivant les axes x, y, z :

$$\mathbf{P}_1 = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}; \quad \mathbf{P}_2 = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}; \quad \mathbf{P}_3 = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}.$$

Il a considéré aussi l'opérateur $\mathbf{W}$ qui figure au second membre de l'équation d'ondes :

$$\mathbf{W} = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}$$

qui correspond à l'énergie W , ou encore par raison de symétrie l'opérateur :

$$\mathbf{P}_4 = \frac{h}{2\pi i c} \frac{\partial}{\partial t}.$$

Au quadrivecteur quantité de mouvement-énergie correspond donc un opérateur quadrivectoriel, de même qu'au quadrivecteur de composantes x, y, z, ct correspond un opérateur quadrivectoriel de composantes $x \cdot, y \cdot, z \cdot, ct \cdot$.

3. Equation d'ondes de Dirac. — Pour obtenir l'équation d'ondes de Dirac plaçons-nous d'abord dans le cas du mouvement d'un électron en l'absence de champ.

La fonction hamiltonienne de la mécanique relativiste classique est :

$$H = c \sqrt{m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}.$$

On ne peut, pour obtenir l'équation d'ondes, remplacer dans cette fonction les p par les $\mathbf{P}$, car l'opérateur ainsi obtenu ne serait pas linéaire.

En mécanique ancienne relativiste, si W est l'énergie, on a :

$$W - H = 0.$$

Multiplions par $W + H$, on a :

$$W^2 - H^2 = 0$$

ou :

$$\frac{W^2}{c^2} - m^2 c^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = 0.$$

Il nous faut trouver un opérateur $\mathbf{H}$ correspondant à la fonction H pour conserver l'esprit de la mécanique ondulatoire, et puisque l'opérateur $\mathbf{W}$ correspond à l'énergie W classique tel que :

$$(\mathbf{W} - H)\psi = 0. \quad (1)$$

Si nous multiplions à gauche par $\mathbf{W} + \mathbf{H}$ on aura, si nous supposons $\mathbf{WH} = \mathbf{HW}$:

$$(\mathbf{W}^2 - \mathbf{H}^2)\psi = 0. \quad (2)$$

Les équations (1) et (2) ne sont pas équivalentes ; en effet, toute solution de (1) est solution de (2), mais la réciproque n'est pas vraie. Seules les solutions de (2) qui correspondent à des valeurs propres positives pour $\mathbf{W}$ sont solutions de (1).

D'autre part, nous avons vu que, d'après Dirac, l'équation d'ondes devait être linéaire en $\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \mathbf{P}_3, \mathbf{W}$.

Pour qu'elle soit en gros équivalente à (2), il faut alors qu'elle ait la forme :

$$(\mathbf{P}_4 + \alpha_1 \mathbf{P}_1 + \alpha_2 \mathbf{P}_2 + \alpha_3 \mathbf{P}_3 + \beta)\psi = 0 \quad (3)$$

les α_i et β étant des opérateurs indépendants des $\mathbf{P}$ et de $\mathbf{W}$. Comme nous considérons le cas où il n'y a pas de champ, tous les points de l'espace temps doivent être équivalents, donc les α et β devront aussi être indépendants de x, y, z, t .

Multiplions à gauche par :

$$\mathbf{P}_4 - \alpha_1 \mathbf{P}_1 - \alpha_2 \mathbf{P}_2 - \alpha_3 \mathbf{P}_3 - \beta.$$

On obtient, en posant $\beta = \alpha_4 m_0 c$;

$$\left\{ \mathbf{P}_i^2 - \sum_{1,2,3} [\alpha_i^2 \mathbf{P}_i^2 + (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) \mathbf{P}_i \mathbf{P}_j + m_0 c (\alpha_i \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_i) \mathbf{P}_i] - \alpha_i^2 m_0^2 c^2 \right\} \psi = 0.$$

Cette équation sera identique à (2) avec correspondance entre l'opérateur $\mathbf{H}$ et la fonction $\mathbf{H}$ classique si on a :

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2, 3, 4,$$

c'est-à-dire que les quatre α anticommulent tous entre eux, et le carré de chacun est l'unité.

Ainsi, en donnant aux α des propriétés convenables, on peut rendre l'équation d'ondes (3) équivalente à (2). Dirac a fait alors l'hypothèse que (3) est l'équation d'ondes relativiste exacte pour le mouvement d'un électron en l'absence d'un champ extérieur. Ceci donne lieu cependant à une grosse difficulté, du fait que (3) comme (2), n'est pas exactement équivalente à (1), mais permet des solutions correspondant à des valeurs propres de $\mathbf{H}$ tant négatives que positives. Ces valeurs propres négatives de l'énergie ne correspondent à aucun mouvement observable de l'électron, et leur interprétation physique n'est pas encore clairement résolue.

Les opérateurs α de Dirac, qui doivent être hermitiques, ont des propriétés algébriques semblables à celles des opérateurs $\mathbf{S}$ de Pauli. On peut considérer qu'ils opèrent sur l'indice ζ . Mais, si on les représentait par des matrices à

deux lignes et deux colonnes, on ne pourrait pas, par ce moyen, définir plus de trois quantités anticommutatives. Pour les représenter, Dirac a pris des matrices à quatre lignes et quatre colonnes, qui sont les suivantes dans les systèmes de références où, comme dans la théorie de Pauli, on attribue à l'axe oz le rôle particulier d'être l'axe suivant lequel on cherche les probabilités des valeurs du spin :

$$\alpha_1 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \alpha_2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & +i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & +i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \alpha_4 = \begin{vmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$$

On vérifie bien que ces matrices sont hermitiques, et que les règles des commutation sont satisfaites.

Par un raisonnement analogue à celui que nous avons fait pour la théorie de Pauli, on verrait que la fonction ψ se décompose en quatre fonctions $\psi_k(x, y, z, t)$ et l'équation d'ondes en quatre équations. L'indice k peut par conséquent prendre ici quatre valeurs.

Dans la théorie de Pauli, nous avons vu que, pour tenir compte du spin, il était nécessaire d'avoir une fonction d'onde $\overleftarrow{\psi}$ à deux composantes ψ_1, ψ_2 . Le fait que la théorie de Dirac en donne quatre est dû à ce que l'équation d'ondes (3) a deux fois plus de solutions qu'elle ne devrait en avoir, la moitié d'entre elles correspondant à des états d'énergie cinétique négative.

4. Equation de Dirac dans le cas d'un champ électromagnétique. — Pour généraliser l'équation d'ondes (3) au cas où il y a un champ magnétique, Dirac s'est laissé guider par l'analogie avec la mécanique relativiste classique : on obtient la nouvelle fonction hamiltonienne en remplaçant :

$$p_i \text{ par } P_i = p_i + \frac{e}{c} A_i \quad i = 1, 2, 3,$$

A_i étant la i^{e} composante du potentiel vecteur,

$$p_4 \text{ par } P_4 = p_4 + \frac{e}{c} U,$$

U étant le potentiel scalaire.

Dirac a fait de même pour l'équation (3); d'où l'équation d'ondes de l'électron dans un champ électromagnétique :

$$[P_4 + \frac{e}{c} U + \sum \alpha_i (P_i + \frac{e}{c} A_i) + \alpha_4 m_0 c] \psi = 0. \quad (4)$$

Il a montré que cette équation est invariante par rapport à une transformation de Lorentz ou, d'une façon plus précise, les résultats physiques auxquels conduit la théorie sont indépendants du système de référence de Lorentz utilisé.

Ceci n'est pas évident. Nous n'en referons pas la démonstration. Dirac a écrit l'équation d'ondes dans deux systèmes de Lorentz différents et montré que les solutions ψ' et ψ peuvent être mises en correspondance une à une de façon qu'il soit légitime d'admettre que les solutions correspondantes représentent le même état.

Pour chaque système de Lorentz, le principe des interférences est valable, et $\sum_k e \psi_k(x, y, z, t) \dot{\psi}_k^*(x, y, z, t)$ est de la nature d'une densité électrique; les valeurs de cette quantité doivent donc se composer comme les quatrièmes composantes d'un quadrivecteur. En outre, sa divergence quadridimensionnelle doit s'évanouir pour qu'il y ait conservation de la charge.

Pour que l'invariance soit vérifiée, il suffit de s'assurer qu'elle a lieu pour des transformations particulières convenables, par exemple : 1° pour une rotation d'argument hyperbolique θ dans le plan x, t ; 2° pour une rotation d'un angle φ autour de l'axe ox le long duquel a lieu la translation; 3° pour une rotation d'un angle χ autour d'un axe perpendiculaire à ox , car tout changement d'axes de réfère-

rence équivaut à composer des transformations de ce type. C'est ce qu'a fait Dirac.

De plus, lorsqu'on effectue une transformation de Lorentz, Dirac a montré qu'entre les ψ'_i et les ψ_j , fonctions d'ondes des deux systèmes, existaient des relations linéaires de la forme :

$$\psi'_i = \sum_j u_{ij} \psi_j$$

et que $\int \left(\sum_k \psi_k \dot{\psi}_k^* \right) d\tau$ est invariant et constamment égal à l'unité. La matrice u_{ij} est donc unitaire, puisqu'elle conserve la forme de ψ .

Ces propriétés nous conduisent, comme dans la théorie de Pauli, à considérer les fonctions $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ non pas comme les quatre valeurs d'une fonction $\psi(x, y, z, \zeta, t)$ mais comme les quatre composantes d'un vecteur de l'espace (ψ_4) .

Ce vecteur $\overleftarrow{\psi}$, élément d'un espace de Hilbert, a une signification intrinsèque : il est une fonction de point de l'espace-temps et est indépendant du système de Lorentz utilisé. Les composantes au contraire en dépendent et, lorsqu'on change de système de référence, elles se transforment.

Sous le nom de « spinor » Van der Waerden ⁽¹²⁾ a défini une catégorie d'éléments dans laquelle rentre $\overleftarrow{\psi}$; mais il a laissé de côté ce fait fondamental que $\overleftarrow{\psi}$ est un élément d'un espace de Hilbert, ce que ne sont pas les spinors en général.

En résumé, c'est l'espace (ψ_4) qu'il faut adopter pour espace des fonctions d'ondes. A chaque transformation de Lorentz correspond une matrice u_{ij} définissant une transformation linéaire entre les composantes du vecteur $\overleftarrow{\psi}$, de même que, pour la mécanique de Pauli, à chaque changement d'axes de coordonnées correspondait une matrice u_{ij} .

Enfin, on vérifie que les quatre ψ_k obéissent à l'équation

du second ordre (3). Il y a là une certaine analogie avec le passage des équations de Maxwell à l'équation de propagation électromagnétique. Mais il y a la même différence dans ce passage qu'entre la polarisation de l'onde $\overleftarrow{\psi}$ et la polarisation du vecteur lumineux de Fresnel dû au fait que $\overleftarrow{\psi}$, vecteur de l'espace (ψ_4), n'est pas un vecteur d'espace-temps.

5. Existence du spin. — Posons :

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{P}_i + \frac{e}{c} \mathbf{A}_i, (i = 1, 2, 3); \quad \mathbf{P}_4 = \mathbf{P}_4 + \frac{e}{c} \mathbf{U}$$

si on multiplie à gauche par :

$$[\mathbf{P}_4 + (\sum \alpha_i \mathbf{P}_i + \alpha_4 m_0 c)]$$

l'équation :

$$\left[\mathbf{P}_4 + \left(\sum_i \alpha_i \mathbf{P}_i + \alpha_4 m_0 c \right) \right] \overleftarrow{\psi} = 0$$

comme, d'après les équations de l'électromagnétisme :

$$\vec{\mathbf{E}} = - \text{grad } u - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad \vec{\mathbf{H}} = \text{rot } \mathbf{A}$$

on obtient après réduction :

$$\left\{ \mathbf{P}_4 - \sum_{i=1}^3 \mathbf{P}_i - m_0 c - \frac{e}{c} \frac{h}{2\pi i} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \mathbf{E}_i - \frac{h}{2\pi i} (\alpha_1 \alpha_2 H_z + \alpha_2 \alpha_3 H_x + \alpha_3 \alpha_1 H_y) \right\} \overleftarrow{\psi} = 0,$$

on voit que les ψ_k ne se séparent pas, sauf si $\vec{\mathbf{H}} = \vec{\mathbf{E}} = 0$. Au lieu de l'opérateur auquel on s'attendrait d'après la théorie classique, il y a deux termes supplémentaires dont l'un :

$-\frac{h}{2\pi i} \sum \alpha_i \alpha_j H_k$ correspond à un moment magnétique de l'électron $+\frac{eh}{4\pi m_0 c}$, qui correspond donc au spin. L'autre

correspond à un moment électrique, comme l'a montré Louis de Broglie ⁽⁴³⁾.

Ainsi, la mécanique de Dirac tient compte à la fois des corrections de relativité et du spin, et le spin se trouve introduit obligatoirement par la linéarisation de l'hamiltonien, de sorte que spin et relativité se trouvent en liaison intime.

6. Vitesse en mécanique de Dirac. — Considérons l'opérateur $\vec{Q}$ qui correspond à la position.

Si on considère la matrice associée à une des composantes, Q_x par exemple, en appliquant la règle de dérivation des matrices, on trouve, en vertu de l'équation d'ondes :

$$\frac{dx_{mn}}{dt} = \int [\psi_m^* (-c\alpha_1) \psi_n] d\tau$$

Si on désigne par $\frac{dQ_x}{dt}$ l'opérateur associé à la matrice $\frac{dx_{mn}}{dt}$ on a :

$$\frac{dQ_x}{dt} = \frac{dx_x}{dt} = -c\alpha_1.$$

Il en est de même pour les deux autres composantes. On peut appeler « Opérateur vitesse » l'opérateur vectoriel $\frac{d\vec{Q}}{dt}$ de composantes $\frac{dx_x}{dt}$, $\frac{dy_y}{dt}$, $\frac{dz_z}{dt}$.

Dans la théorie de Dirac, l'opérateur vitesse est donc bien différent de l'opérateur moment. On voit que l'hamiltonien est alors l'opérateur correspondant à une force vive exprimée par $\Sigma q'p$ et non $\Sigma \frac{p^2}{m}$ comme en mécanique ondulatoire simple. Les valeurs propres d'un opérateur α sont $+1$ et -1 , donc, si on fait une mesure, on trouvera pour valeur de la vitesse $\pm c$. On peut chercher à interpréter cette vitesse en disant que : « Si à un instant t on a localisé le corpuscule en un point M_0 , à un instant postérieur t_1 le cor-

puscule sera à l'intérieur de la sphère de rayon $c(t_1 - t_0)$. Ou bien, on peut dire encore que c est la vitesse du front de l'onde ψ . Ainsi, la mécanique de Dirac respecte le principe d'une vitesse maxima égale à c .

7. Concepts et postulats de la mécanique de Dirac. — La mécanique de Dirac, comme les deux autres mécaniques ondulatoires que nous avons examinées, forme un système logique indépendant. Pour en énoncer les concepts et postulats, deux voies se présentent : soit chercher à les mettre sous la forme la plus en accord avec la théorie de la relativité, soit sous la forme se rapprochant le plus étroitement de ceux de la mécanique ondulatoire simple.

La première directive nous donne les énoncés suivants :

A. 1° *Concept « corpuscule »*. — Aux corpuscules sont attachés des coefficients qui les caractérisent, comme leur masse m_0 et leur charge électrique e .

2° *Postulat 1*. — a) A chaque corpuscule est attaché un point d'un espace de Minkowski, dont le ds^2 est :

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 - c^2 dt^2,$$

qu'on appelle « espace-temps » (C'est l'espace temps de la relativité restreinte);

B. 3° *Concept « grandeur mécanique attachée à un corpuscule »*;

4° *Postulat 2*. — A toute grandeur mécanique correspond un opérateur linéaire formé à partir des coordonnées spatiales x, y, z du point figuratif;

5° Les définitions énoncées en mécanique ondulatoire simple, p. 27; 6°, sont à maintenir ici, ainsi que le postulat 3 (premier principe de quantification), mais la condition c) est à remplacer par : « Les fonctions propres ou différentielles propres sont des éléments de l'espace (ψ_4);

6° *Postulat 4*. — Un opérateur de la mécanique de Dirac satisfait à cette condition :

a) C'est un opérateur linéaire de l'espace (ψ_4) .

Puis, aux conditions b) et c) qui sont les mêmes qu'en mécanique ondulatoire simple ;

7° *Postulat 5.* — Second principe de quantification, qui demeure inchangé ;

C. 8° *Postulat 6.* — L'état d'un système mécanique est à chaque instant t représenté par un élément de l'espace (ψ_4) fonction de point de l'espace-temps, $\psi(M, t)$, solution de l'équation d'ondes :

$$\mathbf{L}\psi = 0.$$

D. 9° *Postulat 7. Principe de décomposition spectrale.* — Comme en mécanique de Pauli, on doit l'énoncer ainsi :

« La probabilité pour qu'une mesure faite à l'instant t fournisse une valeur de A dans le m^{e} intervalle Δx_m avec le signe $+$ pour la composante du spin suivant l'axe ox est : $c_{1m}(t) \cdot \dot{c}_{1m}^*(t) + c_{3m}(t) \cdot \dot{c}_{3m}^*(t)$ et avec le signe $-$ elle est $c_{3m}(t) \cdot \dot{c}_{3m}^*(t) + c_{1m}(t) \cdot \dot{c}_{1m}^*(t)$. Si l'on ne précise pas le signe,

elle est $\sum_{k=1}^4 c_{km}(t) \cdot \dot{c}_{km}^*(t)$.

10° *Définitions.* — a) On appelle « opérateur coordonnée Q_j » l'opérateur multiplication par une des coordonnées spatiales du point figuratif du corpuscule dans l'espace temps. L'élément k, l de la matrice associée dans l'espace (ψ_4) est $Q_j \delta_{kl} - (k, l = 1, 2, 3, 4)$.

On peut, par raison de symétrie, introduire l'opérateur ct , « multiplication par ct », mais ce n'est pas un opérateur mécanique.

b) On appelle « opérateur moment conjugué de la j^{e} coordonnée l'opérateur $P_j = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_j}$ $j = 1, 2, 3$,

et l'élément k, l de la matrice associée dans l'espace (ψ_4) est $P_j \delta_{kl} - (k, l = 1, 2, 3, 4)$.

Par raison de symétrie, on peut considérer $\mathbf{P}_4$. (qui figure dans l'équation d'ondes).

c) D'après ces définitions, au corpuscule, ou ce qui est équivalent, au point figuratif M de l'espace-temps, se trouvent attachés deux opérateurs quadrvectoriels, à savoir :

1° L'opérateur $\vec{\mathbf{Q}}$ « multiplication par $\vec{\mathbf{OM}}$ » dont les composantes sont $x_.$, $x_.$, $y_.$, $ct_.$;

2° L'opérateur « quantité de mouvement » $\vec{\mathbf{P}}$, de composantes $\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \mathbf{P}_3, \mathbf{P}_4$.

d) Il existe quatre opérateurs $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ qui définissent des transformations linéaires des composantes des vecteurs de l'espace (ψ_i), et sont définis par des matrices à quatre lignes et quatre colonnes. Ils possèdent deux fois les valeurs propres $+1$ et -1 qui indiquent si la composante du spin suivant l'axe considéré a le signe $+$ ou le signe $-$. Lorsque cet axe est oz les matrices ont la forme indiquée plus haut.

11° *Concept « quadrvecteur potentiel ».*

12° *Postulat 8.* -- L'opérateur $\mathbf{L}$ de l'équation d'ondes est :

$$\mathbf{L} = [\mathbf{P}_4 + \sum_1^3 \alpha_i \mathbf{P}_i + \alpha_4 m_0 c],$$

avec :

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{P}_i + \frac{e}{c} \mathbf{A}_i \quad ; \quad \mathbf{P}_i = -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} ; i = 1, 2, 3.$$

$$\mathbf{P}_4 = \mathbf{P}_4 + \frac{e}{c} \mathbf{U} \quad ; \quad \mathbf{P}_4 = \frac{\hbar}{2\pi i c} \frac{\partial}{\partial t}.$$

Nous pensons avoir ainsi énoncé les principes de la mécanique de Dirac sous la forme la mieux en accord avec la théorie de la relativité. Mais cet accord n'est guère plus qu'une apparence car certaines définitions et certains postulats font jouer au temps un rôle différent de celui des variables d'espace. Il en est particulièrement ainsi pour les définitions du paragraphe 7 (valeurs propres, fonctions propres), et les postulats 3, 4, 5 et 7. Le postulat 6, grâce à la consi-

dération de $\overleftarrow{\psi}$ comme un élément de l'espace (ψ_4) fonction de point de l'espace-temps, et à la considération de l'opérateur $\mathbf{L}$, a pu être mis sous forme relativiste. On voit donc que les postulats liés au formalisme de la théorie peuvent étroitement s'harmoniser avec la relativité. tandis qu'au contraire ceux qui définissent le sens physique des symboles ne permettent pas de réaliser complètement cet accord, par suite du rôle particulier attribué au temps.

Par contre, en suivant la seconde directive, on peut rapprocher les postulats de la mécanique de Dirac, d'une façon très intime, de ceux de la mécanique ondulatoire simple. Pour cela, nous modifierons les énoncés ainsi qu'il suit :

Les postulats des groupes A et B doivent rester sans changement, parce qu'ils sont en accord avec la mécanique ondulatoire ; comme on a convenu de rester dans le même système de référence, on peut considérer une multiplicité spatiale euclidienne à trois dimensions qui sera l'espace dans lequel se propagera l'onde $\overleftarrow{\psi}$. Le postulat 6 est à garder en remplaçant simplement l'opérateur $\mathbf{L}$ par son expression en fonction de $\mathbf{H}$: $\mathbf{H} = c(\mathbf{P}_4 - \mathbf{L})$ pour obtenir l'équation d'ondes habituelle :

$$\mathbf{H}\overleftarrow{\psi} = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \overleftarrow{\psi}}{\partial t}.$$

Le postulat 9 demeure le même, et dans les définitions 100 il suffit, au lieu de définir les opérateurs quadrivectoriels, de ne définir que leurs composantes d'espace. Ensuite il convient de remplacer le concept quadrivecteur potentiel par les concepts de potentiel scalaire et potentiel vecteur du champ électro-magnétique. Enfin, le postulat 8, au lieu de définir la forme de l'opérateur $\mathbf{L}$, doit définir la forme de l'opérateur $\mathbf{H}$:

$$\mathbf{H} = -c \left[\sum_1^3 \alpha_i \mathbf{P}_i - \frac{e}{c} \mathbf{U} + \alpha_4 m_0 c \right].$$

Nous devons remarquer le rôle asymétrique que joue le temps dans la théorie de Dirac ; ce n'est en fait qu'un paramètre. C'est là le point en désaccord avec la relativité. Par exemple, si nous nous fixons une valeur t_1 de t , la fonction d'ondes nous donnera la probabilité pour que le point figuratif soit à cet instant dans un élément de volume $\Delta x . \Delta y . \Delta z$ entourant un point x, y, z . Mais, si nous nous fixons une valeur x_1 de x , elle ne nous donne pas de la même façon la probabilité pour que le point soit dans un volume $\Delta y . \Delta z . c \Delta t$.

Si l'on change de système de référence par une transformation de Lorentz, c'est-à-dire si on considère deux systèmes de référence constitués chacun par exemple d'un corps rigide très lourd obéissant aux lois de la mécanique relativiste à ϵ près sur lequel est gravé un trièdre, situé très loin du corpuscule pour qu'on puisse négliger les interactions, et qu'on fasse les mesures sur le corpuscule dans le second système, le temps de l'observateur de ce second système ne sera pas le même que celui de l'observateur du premier, d'après les formules de transformation, mais ce que la fonction ψ' indiquera, ce sera notamment la probabilité pour qu'à l'instant t' le point figuratif soit en x', y', z' .

On voit donc ainsi, d'une part, que pour définir physiquement une transformation de Lorentz à ϵ près, il faut se donner un système de référence physique qui obéisse à ϵ près aux lois anciennes et que l'on peut appeler avec Jean Perrin ⁽¹⁴⁾ un « référentiel » (en gardant le mot « repère » pour un système de référence mathématique purement abstrait). D'autre part, on voit le sens qu'on doit donner à la fonction ψ du premier système et à la fonction ψ' du second système. Dès lors, l'espace-temps de Minkowski se présente dans la théorie de Dirac de façon assez différente que dans la relativité restreinte d'Einstein.

Cependant, on ne peut pas à vrai dire trouver de désaccord avec les principes de relativité dans la mécanique de Dirac :

la mécanique quantique par suite des relations d'incertitudes ne peut traduire les prévisions que dans un langage de probabilités données en fonction du temps de l'observateur, d'où le rôle différent joué par le temps et les variables d'espace. Mais la théorie de Dirac satisfait au principe de relativité tel qu'il a été formulé par Einstein ⁽⁴⁵⁾ : « Etant donnés deux systèmes de coordonnées en translation uniforme l'un par rapport à l'autre, les lois auxquelles sont soumis les changements d'état des systèmes physiques restent les mêmes quel que soit le système de coordonnées auquel ces changements sont apportés ». Elle satisfait aussi au principe d'une vitesse maxima égale à celle de la lumière ; enfin le formalisme de la théorie se met sous une forme parfaitement relativiste : les ψ sont des éléments fonctions de point de l'espace-temps ayant une signification intrinsèque indépendante du système de référence, l'équation d'ondes a une forme invariante, et les opérateurs mécaniques peuvent être définis comme des opérateurs quadrivectoriels. Dans ce sens, seulement, on peut dire que la théorie de Dirac est bien en accord avec la relativité. Mais des difficultés se présentent lorsqu'on ne peut négliger l'imprécision ϵ avec laquelle sont reliés les deux référentiels, ϵ étant borné inférieurement.

Ce qui est intéressant pour nous qui cherchons à relier entre elles les diverses mécaniques ondulatoires, c'est qu'en se plaçant dans un système de référence et en n'en changeant pas, c'est-à-dire en faisant toutes nos mesures dans le même système, nous avons la même équation d'ondes formelle pour le mouvement d'un corpuscule que dans le cas des deux autres mécaniques ondulatoires. C'est ainsi que les concepts et postulats des trois théories peuvent être mis sous une forme très voisine qui les apparente.

CHAPITRE IV

Mécanique ponctuelle de l'espace (ψ).

I. Introduction. — Nous allons, à partir de maintenant, examiner du point de vue des principes plusieurs des théories qui sont dérivées de la mécanique ondulatoire, et qui ont pour but l'étude de certains phénomènes quantiques. Leur formalisme est calqué sur celui de la Mécanique Ondulatoire. Ou bien elles lui sont équivalentes, en utilisant d'autres méthodes, ou bien elles la prolongent.

Nous commencerons par la plus importante d'entre elles : la superquantification. C'est d'ailleurs la seule que nous développerons, nous bornant à de simples aperçus sur les autres.

La superquantification est d'abord une méthode d'étude d'une assemblée de systèmes identiques. Tandis que la mécanique ondulatoire donne le *nombre probable* de systèmes dans les divers états, en superquantification, on choisit une répartition des systèmes et on cherche la probabilité pour qu'elle soit réalisée.

D'une façon plus précise, si ψ est la fonction d'ondes normée d'un système, x_s la s^e composante de ψ dans le système des fonctions propres et différentielles propres de la grandeur A considérée :

$$\psi = \sum_s x_s \varphi_s$$

$x_s x_s^*$ donne la probabilité que le système soit dans l'état s . Si l'assemblée est formée de $\mathfrak{N}$ systèmes, le nombre proba-

ble dans l'état s est $\mathfrak{N}x_sx_s$. En superquantification au contraire, on calcule la probabilité qu'il y en ait n_1 dans l'état 1, n_2 dans l'état 2, ... n_s dans l'état s , ...

Le problème fondamental, tel que l'a énoncé Fock ⁽¹⁶⁾, est le suivant : « Connaissant les probabilités de répartition initiales par rapport à une grandeur A, trouver à l'instant t les probabilités de répartition par rapport à une grandeur B ».

Le formalisme est calqué sur celui de la Mécanique Ondulatoire : on a une fonction d'ondes dont on tire les probabilités par un principe analogue au principe de décomposition spectrale.

La donnée de probabilité de répartition initiale n'est pas une donnée arbitraire de mathématicien, car il y a de nombreuses expériences où l'on mesure des répartitions, par exemple toutes celles où l'on prend des clichés photographiques d'un spectre. Par des mesures répétées en effectuant une statistique, on en déduit les probabilités de répartition initiales. Il est même plus en accord avec la physique de parler de probabilités de répartition que d'une répartition unique, soit à cause d'erreurs expérimentales, soit par suite d'une limite à la précision des expériences imposée par la nature.

Non seulement la superquantification est une méthode différenté de la Mécanique Ondulatoire, mais c'est une théorie physique plus générale. Elle lui est identique si le nombre $\mathfrak{N}$ des systèmes est égal à un, elle lui est équivalente pour les « cas purs », c'est-à-dire si l'on donne la répartition initiale. Elle la dépasse si l'on a une probabilité de répartition initiale.

La théorie trouve ses applications les plus importantes dans les problèmes où intervient le rayonnement, car jusqu'à maintenant il n'est pas possible de les traiter par la mécanique ondulatoire avec l'espace de configuration, ne connaissant pas les lois d'interaction entre photons et autres corpuscules.

La superquantification a été introduite par Dirac ⁽¹⁷⁾ en 1927 pour les systèmes obéissant à la statistique de Bose-Einstein; il s'est borné à considérer la grandeur énergie, et a calculé par cette méthode les coefficients A et B d'Einstein. L'année suivante, Fock ⁽¹⁸⁾ a généralisé et clarifié la théorie, et Heisenberg ⁽¹⁹⁾ l'a utilisée pour l'étude de la diffusion et de l'effet Raman. Bien d'autres mémoires ont paru sur la question, parmi lesquels ceux de Landé ⁽¹⁹⁾, de Jordan ⁽²⁰⁾, de Fock ⁽²¹⁾.

Les auteurs se sont préoccupés davantage des résultats obtenus que d'un bon développement logique.

Pour parvenir à la superquantification, on peut suivre plusieurs voies. En premier lieu, il faut montrer l'équivalence de la mécanique ondulatoire avec ce qu'on peut appeler la mécanique ponctuelle de l'espace (ψ) des fonctions d'ondes : c'est ce que nous allons préciser dans ce chapitre. Deux procédés se présentent alors pour obtenir la superquantification, soit qu'on passe de la mécanique ponctuelle (ψ) à la mécanique ondulatoire de cet espace, soit qu'on effectue une transformation de contact conduisant à la mécanique ponctuelle d'un espace que nous désignerons par (n), puis à la mécanique ondulatoire (n). Notons pour mémoire que Fock ⁽²¹⁾ a indiqué récemment un autre procédé. Ces deux méthodes (n) et (ψ) demanderaient à être exposées simultanément. Celle de l'espace (n) est plus immédiate, car elle ne fait appel qu'au principe des interférences, mais elle soulève des objections. Dirac l'avait suivie. Celle de l'espace (ψ) nous paraît bien meilleure quoique moins immédiate, car elle fait appel au principe de décomposition spectrale pour une grandeur dérivée. Sans connaître la méthode de Dirac, on ne s'y serait probablement pas aventuré.

Nous commencerons donc par montrer l'équivalence de la mécanique ondulatoire et de la mécanique ponctuelle de l'espace (ψ); ensuite nous développerons la mécanique (n) puis la mécanique (ψ). Enfin, nous vérifierons l'équivalence des deux méthodes.

2. Théorèmes de Dirac-Fock. — Ces théorèmes permettent de passer d'une mécanique ondulatoire à la mécanique ponctuelle de l'espace des fonctions d'ondes. Ils sont très importants et forment presque la contre-partie de la méthode de Louis de Broglie du passage d'une mécanique ponctuelle à une mécanique ondulatoire dans le même espace. Dirac ⁽¹⁵⁾ s'était borné uniquement à un cas particulier où il considérait l'énergie, Fock ⁽¹⁶⁾ l'a étendu pour une grandeur quelconque, c'est-à-dire pour un système de références quelconque dans l'espace des fonctions d'ondes, mais en se bornant à une grandeur ayant un spectre discontinu. Nous pourrions l'étendre au cas de spectre continu ou en partie continu et en partie discontinu, et au cas où l'opérateur correspondant à la grandeur considérée est incomplet. Il suffit pour cela de prendre la notation des différentielles propres généralisée.

Considérons une fonction ψ solution de l'équation d'ondes

$$\mathbf{H}\psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

l'hamiltonien $\mathbf{H}$ étant celui de l'une quelconque des trois mécaniques que nous avons étudiées jusqu'à présent. Nous les appellerons « Mécaniques Ondulatoires Usuelles ».

Le développement de ψ dans le système de base des fonctions propres et différentielles propres φ_r d'un opérateur $\mathbf{B}$ est :

$$\psi = \sum_r y_r \varphi_r.$$

Si $\mathbf{B}$ est incomplet, on devra développer non pas ψ , mais la fonction ψ_n obtenue en intégrant ψ sur l'ensemble des valeurs des variables qui n'intéressent pas l'opérateur $\mathbf{B}$:

(Voir p. 29).

$$\psi_n = \int \psi d\tau_1.$$

1^{er} Théorème. — Il consiste à trouver un système différen-

tiel auquel obéissent les y_r . Pour y parvenir, considérons deux grandeurs A et B qui peuvent dépendre du temps, l'opérateur $\mathbf{A}$ correspondant à A étant complet. Soient α_s et f_s ses valeurs propres et différentielles propres généralisée, β_s et φ_s celles de l'opérateur $\mathbf{B}$, enfin ψ_s les fonctions satisfaisant à l'équation d'ondes et se réduisant à f_s à l'instant initial.

Fock a démontré que les fonctions ψ_s qui forment à l'instant initial un système de base complet gardent cette propriété au cours du temps.

On a donc :

$$\psi(t) = \sum_s g_s \psi_s(t) \quad (1)$$

$$\psi(t) = \sum_r y_r(t) \varphi_r(t) \quad (2)$$

Pour obtenir les équations cherchées, Fock a multiplié scalairement ψ par φ_r et égalé les seconds membres de (1) et (2), ce qui est possible en vertu du fait que :

$$(\varphi_r \cdot \psi_B) = (\varphi_r \cdot \psi),$$

car les ψ étant des éléments d'un espace (ψ_m) avec $m = 1, 2, 4$ si on désigne par $d\tau_1$ les produits des différentielles des variables qui n'intéressent pas $\mathbf{B}$, $d\tau_2$ le produit des autres, on a :

$$\begin{aligned} (\varphi_r \cdot \psi) &= \int \sum_{k=1}^m \varphi_{r;k}^* \varphi_k d\tau = \int \sum_{k=1}^m \varphi_{r;k}^* \left[\int \psi_k d\tau_1 \right] d\tau_2 \\ &= \int \sum_{k=1}^m \varphi_{r;k}^* \psi_{B,k} d\tau_2 = (\varphi_r \cdot \psi_B). \end{aligned}$$

Posons :

$$Y_{rs} = (\varphi_r \cdot \psi_s).$$

On a :

$$y_r = \sum_s g_s Y_{rs}$$

et aussi :

$$\psi_{\mathbf{B},s}(t) = \sum_l Y_{ls} \varphi_l.$$

On vérifie que la matrice Y_{rs} est unitaire. Elle définit un changement de coordonnées orthonormal dans la multiplicité de (ψ) déterminée par les fonctions des variables intéressant $\mathbf{B}$ seulement. Si on dérive par rapport au temps, on a :

$$\frac{dY_{rs}}{dt} = \left(\frac{\partial \varphi_r}{\partial t} \cdot \psi_s \right) + \left(\varphi_r \cdot \frac{\partial \psi_s}{\partial t} \right).$$

En vertu de l'équation d'ondes, on peut écrire :

$$\frac{dY_{rs}}{dt} = \left(\frac{\partial \varphi_r}{\partial t} \cdot \psi_s \right) + \frac{2\pi i}{h} (\varphi_r \cdot \mathbf{H} \psi_s).$$

Remplaçons $\mathbf{H} \psi_s$ par $\mathbf{H} \psi_{\mathbf{B},s}$ ce qui ne change pas le produit scalaire, puis $\psi_{\mathbf{B},s}$ par son développement en φ_l , on a alors, à condition que les φ_l soient opérables par $\mathbf{H}$:

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{dY_{rs}}{dt} = \sum_l \left[\frac{h}{2\pi i} \left(\frac{\partial \varphi_r}{\partial t} \cdot \varphi_l \right) + (\varphi_r \cdot \mathbf{H} \varphi_l) \right] Y_{ls},$$

car Y_{ls} ne dépendant pas des variables d'espace peut être mis en dehors du produit scalaire. Comme :

$$(\varphi_r \cdot \varphi_l) = \delta_{rl},$$

on a en dérivant :

$$\left(\frac{\partial \varphi_r}{\partial t} \cdot \varphi_l \right) + \left(\varphi_r \cdot \frac{\partial \varphi_l}{\partial t} \right) = 0,$$

ce qui nous permet de grouper les deux produits scalaires en un seul, et en posant :

$$K_{rl} = \left(\varphi_r \cdot \left[\mathbf{H} - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right] \varphi_l \right) = (\varphi_r \cdot \mathbf{L} \varphi_l)$$

d'écrire :

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{dY_{rs}}{dt} = \sum_l K_{rl} Y_{ls}$$

Remarquons que les K_{rl} en général dépendent du temps, et forment les éléments d'une matrice hermitique qui correspond à l'opérateur $\mathbf{L}$ dans la multiplicité déterminée par les φ_l . Cet opérateur $\mathbf{L}$ diffère de l'opérateur $\mathbf{L}$ que nous avons rencontré en Mécanique de Dirac par la constante multiplicative c .

Comme $y_r = \sum_s g_s Y_{rs}$, les y_r satisfont à des équations du même type, et comme l'opérateur $\mathbf{B}$ est n'importe quel opérateur ayant un spectre tel que les fonctions propres forment un système orthonormal complet pour les variables intéressant l'opérateur $\mathbf{B}$, on peut énoncer :

Premier Théorème de Dirac-Fock : « Les coefficients y_r du développement :

1° d'une fonction ψ solution de l'équation d'ondes dans un système de base orthonormal complet $\{\varphi_n\}$;

2° Dans le système des fonctions propres et différentielles propres d'un opérateur mécanique $\mathbf{B}$, de la fonction $\psi_B = \int \psi d\tau_1$, obtenue en intégrant la fonction ψ sur l'ensemble des valeurs des variables n'intéressant pas l'opérateur $\mathbf{B}$, satisfont, lorsque la matrice K_{rl} existe (il faut pour cela que les φ_n soient opérables par $\mathbf{L}$), au système d'équations différentielles :

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{dy_r}{dt} = \sum_l K_{rl} y_l. \quad (3)$$

En particulier, si l'on considère le système de base des ψ_s , on voit que les g_s sont bien constants.

Nous allons parvenir au second théorème en considérant le système conjugué qui, en vertu de l'hermiticité de la matrice K_{rl} , s'écrit :

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{dy_s^*}{dt} = - \sum_l K_{ls}^* y_l^*. \quad (3')$$

Posons :

$$F = \sum_{rs} K_{rs} y_s y_r^*.$$

Remarquons que F n'est pas nul, car $\mathbf{L}$ contenant $\frac{\partial}{\partial t}$ le produit $(\varphi_r \cdot \mathbf{L} \varphi_s) y_s$ est différent de $(\varphi_r \cdot \mathbf{L} y_s \varphi_s)$ qui en sommant par rapport à s donne $(\varphi_r \cdot \mathbf{L} \psi)$ qui est nul, $\mathbf{L} \psi$ étant nul. Comme il y a en général une infinité de y_r , F est une fonctionnelle bilinéaire de Gateaux.

On a alors :

$$(4) \quad \frac{h}{2\pi i} \frac{dy_r}{dt} = \frac{\partial F}{\partial y_r^*}; \quad \frac{h}{2\pi i} \frac{dy_r^*}{\partial F} = - \frac{\partial F}{\partial y_r} \quad (5)$$

d'où :

Second Théorème de Dirac-Fock. — « Si l'on considère la fonctionnelle F comme une fonction hamiltonienne, les quantités y_r et $\frac{h}{2\pi i} y_r^*$ sont canoniquement conjuguées :

1° Si les y_r sont les coordonnées, les moments conjugués sont :

$$p_r = \frac{h}{2\pi i} y_r^*;$$

2° Si les y_r^* sont les coordonnées, les moments conjugués sont :

$$p_{r^*} = - \frac{h}{2\pi i} y_r.$$

Mécanique ponctuelle dans l'espace (ψ). — En adoptant par exemple le premier choix de variables, on peut considérer que les y_r sont les coordonnées rectangulaires d'un point M dans le système d'axe des φ_r , que les p_r sont les composantes de sa quantité de mouvement, et que les équations (4) et (5) sont les équations de la dynamique de l'espace (ψ) qui

définissent le mouvement du point M dans (ψ) . Nous pouvons les écrire sous la forme suivante :

$$\frac{dy_r}{dt} = \frac{\partial F}{\partial p_r} \qquad \frac{dp_r}{dt} = - \frac{\partial F}{\partial y_r}. \quad (6)$$

Il est indifférent de prendre le premier ou le deuxième choix de variables, puisque cela revient à prendre les équations conjuguées.

Sous forme vectorielle, on peut écrire :

$$\overrightarrow{OM} = \psi(t) \qquad \overrightarrow{p} = \frac{h}{2\pi i} \psi^*(t).$$

Les y_r et les p_r sont les composantes de ces deux vecteurs dans le système base des φ_l correspondant à la grandeur B. Si l'on effectue un changement de système de base, c'est-à-dire qu'au lieu de considérer la grandeur B on en considère une autre, les équations liant les composantes de $\overrightarrow{OM}$ et de $\overrightarrow{p}$ gardent la forme (6), et les y_r et p_r se transforment comme les composantes d'un vecteur.

Cherchons comment se transforme F dans un changement de coordonnées. Pour cela, évaluons une quantité qui lui soit égale. En vertu des équations (6), on a :

$$F = \frac{h}{2\pi i} \sum_r y_r^* y'_r \qquad \left(y'_r = \frac{dy_r}{dt} \right).$$

Désignons par $\overrightarrow{v_{rel}}$ la « vitesse » du point M (défini par $\overrightarrow{OM} = \psi$) par rapport au système des φ_r . On peut écrire :

$$v_{rel} = \sum_r y'_r \varphi_r$$

d'où :

$$F = \frac{h}{2\pi i} (\psi, v_{rel}).$$

Sous cette forme, on voit que F est invariant lors d'un chan-

gement de coordonnées qui n'affecte pas la vitesse relative. Au contraire, si l'on prend un nouveau système de base animé d'un mouvement quelconque, la forme canonique des équations est conservée, mais le nouvel hamiltonien F_1 a une valeur différente correspondant à la nouvelle vitesse relative $\vec{v}_{rel}$.

Il n'y a donc pas de difficulté à considérer une mécanique ponctuelle d'un espace de Hilbert. Les coordonnées du point M, les composantes de la vitesse relative $\vec{v}_{rel}$ et celles de la quantité de mouvement $\vec{p}$ possèdent bien le caractère vectoriel, et l'hamiltonien F est égal à un produit scalaire. Enfin, les équations du mouvement du point M s'écrivent sous forme canoniques.

4. Fonction de Lagrange et principe d'Hamilton de la mécanique (ψ). — Comme pour la mécanique classique, nous devons chercher ⁽²²⁾ à faire dériver les équations de la mécanique ponctuelle (ψ) d'un principe d'Hamilton.

D'après la définition de la fonction hamiltonienne, nous devons avoir :

$$F = \sum_i p_i y'_i - \mathcal{L}(\dots y_i \dots; \dots, y'_i \dots; t),$$

de sorte qu'en remplaçant les p_i par leurs expressions en fonction des y_i on a :

$$\mathcal{L} = \sum_r y_r^* \left(\frac{h}{2\pi i} y'_r - \sum_s K_{rs} y_s \right). \quad (7)$$

Nous avons vu que F était égal à $\frac{h}{2\pi i} (\psi, \vec{v}_{rel})$, or le premier terme de $\mathcal{L}$ n'est autre que ce produit scalaire et la valeur de $\mathcal{L}$ est constamment zéro au cours de l'évolution du système.

Mais si l'on part de l'expression (7) et qu'on écrive les équations de Lagrange correspondantes :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'_r} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_s} = 0, \quad (8)$$

on trouve qu'elles sont identiques aux équations (3'), car :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'_r} = \frac{h}{2\pi i} \dot{y}_s^* \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_s} = - \sum_l K_{ls} \dot{y}_l^*.$$

On peut énoncer alors un principe d'Hamilton pour la mécanique pontuelle (ψ) :

« Le mouvement du point M défini par $\vec{OM} = \vec{r}(t)$ entre les instants t_0 et t_1 est caractérisé par le fait que l'intégrale $\int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L} dt$ est stationnaire.

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L} dt = 0 ».$$

Les équations de Lagrange écrites ci-dessus expriment les conditions du premier ordre de cet extremum. En effet, on a :

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L} dt = \int_{t_0}^{t_1} \sum_r \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_r} \delta y_r + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'_r} \delta y'_r \right) dt,$$

puis, commutant δ et d dans $\delta y'_r$ et intégrant par parties on arrive à :

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L} dt = \int_{t_0}^{t_1} \left\{ \sum_r \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_r} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'_r} \right) \right] \delta y_r + \sum_r \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'_r} \delta y'_r \right\} dt.$$

Pour que l'extremum soit réalisé, il faut que chaque crochet soit nul, ainsi que les dérivés $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_r}$.

Or, les équations de Lagrange (8) expriment que les crochets sont nuls, et en vertu de la forme de la fonction de

Lagrange, les équations obtenues en écrivant que les $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_r}$ sont nuls ne sont autres que les conjuguées des précédentes, c'est-à-dire les équations (3). Ainsi, les conditions du premier ordre de l'extremum sont remplies, soit qu'on annule les coefficients des δy_r , soit ceux des δy_r^* dans l'intégrale, ce qui justifie notre principe d'extremum pour la mécanique (1).

Enfin, on voit qu'on a bien :

$$p_s = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_s},$$

et que, partant des équations de Lagrange, on retombe sur les équations canoniques (6).

Ainsi, pour définir le mouvement du point M caractérisant l'évolution d'un système mécanique, on peut partir soit :

- 1° De l'équation d'ondes (caractérisée par **H**).
- 2° Des équations (3), équations de Lagrange (caractérisées par la matrice K_{rs});
- 3° Des équations canoniques (6), (caractérisées par **F** et par K_{rs});
- 4° De la fonction de Lagrange $\mathcal{L}$ et du principe d'Hamilton. Si on part de l'hamiltonien **H**, les quantités K_{rs} en dérivent, et réciproquement si on part d'une matrice K_{rs} on peut définir un opérateur **L** tel que $K_{rs} = (\varphi_r, \mathbf{L} \varphi_s)$; on a bien équivalence entre les moyens 1° et 2° dans des systèmes de base $\{\varphi_s\}$ convenables.

Il y a également équivalence entre les moyens 3° et 4° en vertu de relations générales.

D'autre part, il y a équivalence entre 1°, 2° et 3°, 4° si l'on prend pour la fonction de Lagrange $\mathcal{L}$ les expressions (7) ou (8). Mais si l'on prenait une expression différente, on pourrait définir le mouvement du point M par les moyens 3° ou 4°, seulement les équations de Lagrange obtenues ne coïncideraient plus avec les équations (3). Il est plus général de

caractériser le mouvement du point M par une fonction de Lagrange $\mathcal{L}$ et par le principe d'Hamilton que par l'équation des ondes ψ caractérisée par l'hamiltonien H . Nous pensons qu'il y a peut être là une généralisation pour les cas où l'on ne pourrait caractériser l'évolution d'un système par un opérateur H .

On peut donc sans changer les conséquences des trois mécaniques quantiques étudiées dans la première partie, leur donner comme cadre formel, au lieu de la Mécanique Ondulatoire, la Mécanique ponctuelle de l'espace (ψ) correspondant. Il faut remplacer alors les postulats 6, 7 et 8 par :

Postulat 6 b : 1° L'évolution d'un système mécanique est caractérisée par le mouvement d'un point M de l'espace (ψ) auquel appartiennent les fonctions propres et différentielles propres.

2° Ce mouvement est caractérisé par un principe d'Hamilton.

Postulat 7 b : Si on prend pour système de base dans l'espace (ψ) les fonctions propres d'un opérateur correspondant à une grandeur mécanique, la probabilité pour que cette grandeur ait une valeur comprise dans le j^e intervalle Δx_j est donnée par le carré du module de la j^e coordonnée de M , soit : $|y_j|^2$.

Postulat 8 b : La fonction de Lagrange $\mathcal{L}$ qui figure dans l'intégrale d'Hamilton est donnée en fonction des coordonnées par la formule (7).

Cette manière de concevoir la mécanique quantique, outre l'intérêt qu'elle offre et les conséquences qu'on peut en tirer, va ouvrir la porte à de nombreuses généralisations.

CHAPITRE V

Superquantification et Mécaniques de l'espace (n) .

Nos précédents raisonnements ayant établi que l'évolution d'un système en mécanique ondulatoire peut être caractérisée par le mouvement d'un point de l'espace (ψ) , vont nous servir de point de départ pour arriver à la superquantification en suivant la première méthode.

1. Variables de Dirac. — Les quantités qui ont un sens physique ne sont pas les y_s et p_s , mais les $n_s^{(B)}$, nombre de systèmes dans l'état s par rapport à la grandeur B. On a alors :

$$n_s = \mathcal{K} y_s y_s^* = \frac{2\pi i}{h} \mathcal{K} y_s p_s.$$

Les théorèmes de Dirac-Fock nous donnent les équations auxquelles obéissent les y_s et p_s . En effectuant une transformation de contact de la dynamique, nous allons obtenir les équations canoniques auxquelles obéissent les variables n_s et leurs moments conjugués que nous désignerons par θ_s .

Auparavant, nous effectuerons un premier changement de variables, en posant :

$$Y_s = \sqrt{\mathcal{K}} y_s, \quad P_s = \sqrt{\mathcal{K}} p_s.$$

On voit de suite que l'hamiltonien garde la même forme, il suffit de remplacer les y_r par les Y_r et les p_s par les P_s . D'où les équations :

$$\frac{dY_s}{dt} = \frac{\partial F}{\partial P_s} \quad \frac{dP_s}{dt} = - \frac{\partial F}{\partial Y_s} \quad (1)$$

Nous devons d'abord étendre au cas d'une infinité de variables la définition d'une transformation de contact de la dynamique.

Partons des équations ci-dessus. Pour qu'on puisse substituer aux variables Y_r, P_r de nouvelles variables n_s, θ_s telles que le système garde sa forme canonique, c'est-à-dire que :

$$\frac{dn_s}{dt} = \frac{\partial F_1}{\partial \theta_s} \quad \frac{d\theta_s}{dt} = - \frac{\partial F_1}{\partial n_s} \quad (2)$$

la condition est que la différence des deux formes $\sum_i P_i \delta Y_i - F \delta t$ et $\sum_s \theta_s \delta n_s - F_1 \delta t$ soit égale à une différentielle totale comme dans le cas d'un nombre fini de variables, d'où :

$$\sum_i P_i \delta Y_i - \sum_s \theta_s \delta n_s - (F - F_1) \delta t = \delta V. \quad (3)$$

Prenons alors comme variables indépendantes au lieu des P_i, Y_i, t , les Y_i, n_s, t . Les différentielles sont mises en évidence au premier membre de l'équation (3).

Si nous choisissons une fonctionnelle arbitraire

$$V (\dots Y_i \dots; \dots n_s \dots; t)$$

nous pouvons substituer à (1) le système équivalent :

$$(4) \quad \left\{ \begin{array}{l} P_i = \frac{\partial V}{\partial Y_i}, \dots, \quad P_i = \frac{\partial V}{\partial Y_i}, \dots \\ \theta_s = - \frac{\partial V}{\partial n_s}, \dots, \quad \theta_s = - \frac{\partial V}{\partial n_s}, \dots \\ F - F_1 = - \frac{\partial V}{\partial t} \end{array} \right.$$

Pour avoir un changement de variables canoniques, il suffit que les formules de la première ligne de (4) soient résolubles par rapport aux n_s ; autrement dit, il suffit d'éviter certains choix de la fonctionnelle V . On porte les valeurs n_s ainsi obtenues dans les formules (4) des deux dernières lignes qui donnent respectivement les formules achevant de définir le changement de variable et la fonction F_1 .

Nous voulons obtenir un changement de variables tel que $n_s = \frac{2\pi i}{h} Y_s P_s$. Mais Y_s et P_s doivent être proportionnels à $\sqrt{n_s}$ car P_s est égal à $\frac{h}{2\pi i} Y_s^*$. En vertu de la relation définissant n_s on voit que $|Y_s|$ doit être égal à $\sqrt{n_s}$. Supposons de plus que l'argument de Y_s soit fonction linéaire de θ_s . On aura :

$$Y_s = \sqrt{n_s} e^{ix\theta_s} \quad P_s = \frac{h}{2\pi i} \sqrt{n_s} e^{-ix\theta_s}.$$

Cherchons une fonction V donnant lieu à un tel changement de variables : V devra être une fonction des Y_s et des n_s telle que :

$$\frac{\partial V}{\partial Y_s} = P_s = \frac{h}{2\pi i} \frac{n_s}{Y_s} \quad ; \quad \frac{\partial V}{\partial n_s} = -\frac{1}{ix} \text{Log} \frac{Y_s}{\sqrt{n_s}}.$$

En intégrant, on a d'abord :

$$V = -\frac{1}{ix} \left[n_s \left(\text{Log} Y_s - \frac{1}{2} \text{Log} n_s + \frac{1}{2} \right) + f \right],$$

f étant une fonction de toutes les variables Y_i et n_j excepté n_s . D'où l'on tire :

$$\frac{\partial V}{\partial Y_s} = -\frac{1}{ix} \left[\frac{n_s}{Y_s} + \frac{\partial f}{\partial Y_s} \right].$$

Cette dernière expression doit être égale à P_s . On voit qu'on peut satisfaire à cette condition en posant, pour toutes les valeurs de s :

$$\frac{\partial f}{\partial Y_s} = 0 \quad x = -\frac{2\pi}{h}.$$

De la sorte nous pouvons prendre comme fonction V caractérisant la transformation canonique cherchée la fonction :

$$V = \sum_s \frac{h}{2\pi i} n_s \left(\text{Log} \frac{Y_s}{\sqrt{n_s}} + \frac{1}{2} \right).$$

On en tire :

$$Y_s = \sqrt{n_s} e^{-\frac{2\pi i}{h} \theta_s} \quad ; \quad P_s = \frac{h}{2\pi i} \sqrt{n_s} e^{\frac{2\pi i}{h} \theta_s}$$

$$n_s = \frac{2\pi i}{h} Y_s P_s = |Y_s|^2 \quad ; \quad \theta_s = -\frac{h}{2\pi} \arg Y_s.$$

On obtient la fonction F_4 en remplaçant simplement dans F les variables Y_s et P_s par leurs expressions en fonction de n_s et θ_s . D'où :

$$F_4 = \sum_s K_{ss} n_s + \sum_{r \neq s} K_{rs} \sqrt{n_s n_r} e^{\frac{2\pi i}{h} (\theta_r - \theta_s)} \quad (5).$$

n_s et θ_s se trouvent alors canoniquement conjugués, F_4 jouant le rôle d'hamiltonien.

2. Espace (n) . — Nous allons admettre avec Dirac, et c'est là un postulat, qu'avec le choix que nous avons fait de la fonction hamiltonienne F_4 , les variables n_s au lieu d'être liées à l'espace des fonctions ψ , peuvent être considérées comme les coordonnées rectangulaires d'un point N dans un certain espace que nous appellerons « espace (n) » ⁽²³⁾. Il joue ici le rôle d'espace de configuration.

Comme l'espace des fonctions ψ est à $\aleph_0$ dimensions, il y a soit $\aleph_0$ variables Y_s , soit un nombre fini suivant l'opérateur $\mathbf{B}$ qu'on a choisi. Les seuls cas où il y en a un nombre fini, 4 ou 2, ne se rencontrent que pour les opérateurs formés uniquement à l'aide des opérateurs α de Dirac, ou des opérateurs $\mathbf{S}$ de Pauli. Donc, en général, il y aura $\aleph_0$ variables n_s liées aux Y_s par une correspondance univoque et continue, et l'espace (n) se trouve lui aussi être à $\aleph_0$ dimensions, sauf dans le cas particulier des opérateurs $\mathbf{S}$ et α où il se réduit à un espace à deux ou quatre dimensions. Ce cas est évidemment plus simple à étudier que celui où il y en a $\aleph_0$. Aussi, pour ne pas compliquer, nous nous bornerons au cas général.

Le point N peut être considéré comme figurant la répartition des systèmes de l'assemblée. On devra alors dire que deux points sont infiniment voisins s'ils correspondent à deux répartitions infiniment voisines des systèmes, par conséquent si les coordonnées de même rang des deux points sont infiniment voisines.

D'où cette définition de la convergence d'une suite de points : Une suite de points $N^{(1)}, N^{(2)}; \dots N^{(p)}, \dots$ est dite tendre vers un point N si les coordonnées de ces points tendent respectivement vers les coordonnées de même rang de N .

On voit que l'espace (n) ressemble à l'espace (E_ω) de Fréchet ⁽²⁴⁾, mais il n'en forme qu'une partie. En effet, les coordonnées $n_1, n_2, \dots, n_s, \dots$ ne forment pas un ensemble dénombrable quelconque, car la série de terme général n_s est convergente et sa somme est égale au nombre de systèmes : de plus, tous les nombres n^s sont positifs.

Pour pouvoir introduire le calcul algébrique sur les vecteurs de l'espace (n) et en particulier le vecteur opposé à un autre vecteur, nous considérerons qu'un point appartient à l'espace (n) même si certaines de ses coordonnées sont négatives, pourvu que la série de ses coordonnées soit absolument convergente.

L'espace (n) ainsi défini se trouve être identique à l'espace des séries absolument convergentes, ou espace (A) .

Il nous faut maintenant définir la « distance » entre deux points. Nous adopterons comme expression celle que prend M. Fréchet ⁽²⁵⁾ pour l'espace (A) . Soient deux points X et Y de coordonnées $x_1, \dots, x_s, \dots; y_1, \dots, y_s, \dots$ le point de coordonnées $x_1 - y_1, \dots, x_s - y_s, \dots$ appartient aussi à l'espace (A) , et la série ci-dessous est convergente; c'est la somme de la série des valeurs absolues que nous prendrons pour expression de la *distance* des deux points :

$$\text{distance } \{X, Y\} = \sum_s |x_s - y_s|.$$

M. Fréchet ⁽²⁵⁾ a démontré que cet espace est un espace ($\mathcal{O}$) *séparable*, que cette distance se prête à une généralisation du critère de Cauchy, et qu'il a bien $\aleph_0$ dimensions.

Nous allons considérer les équations (2) comme les équations du mouvement d'un point N dans cet espace. Des grandeurs mécaniques ayant un caractère vectoriel, nous devons introduire la notion de vecteur dans l'espace (n). Nous sommes dans un cas particulier de l'introduction de vecteurs dans un espace *distancié*, ou espace ($\mathcal{O}$) et cette introduction se fait ici suivant la méthode générale.

M. Fréchet ⁽²⁶⁾ a démontré que l'espace (A) était un espace *vectoriel complet* ou espace de M. Banach, c'est-à-dire que :

1° La longueur d'un vecteur est égale à la distance de ses deux extrémités :

$$\text{distance } \{X, Y\} = \|\vec{XY}\|.$$

2° La condition nécessaire et suffisante pour qu'une suite de points $A_1, A_2, \dots, A_p, \dots$ soit convergente est que la longueur $\|\vec{A_n A_p}\|$ puisse être rendue aussi petite que l'on veut quand n et p sont assez grands.

Il faut remarquer que, dans un tel espace, on a pour trois points quelconques A, B, C :

$$| \|\vec{AC}\| - \|\vec{BC}\| | \leq \|\vec{AB}\| \leq \|\vec{AC}\| + \|\vec{BC}\|$$

et que si les trois points A, B, C sont alignés, l'un des signes d'inégalité peut être supprimé; mais la réciproque n'est pas vraie. La ligne droite n'y est pas nécessairement le plus court chemin d'un point à un autre.

Il est bien évident que, si l'on considère une ligne polygonale $A, A_1, A_2, \dots, A_n, B$ joignant deux points fixes A et B , on aura :

$$\|\vec{AB}\| \leq \|\vec{AA_1}\| + \|\vec{A_1 A_2}\| + \dots + \|\vec{A_n B}\|$$

La longueur AB ne sera supérieure au périmètre d'aucune ligne polygonale joignant A et B, mais il n'est pas impossible qu'elle lui soit égale.

Nous appellerons « sphère » de centre A de coordonnées $a_1, a_2, \dots, a_s, \dots$ dans l'espace (n) la multiplicité lieu des points N de coordonnées $n_1, n_2, \dots, n_s, \dots$ située à une distance constante $\mathfrak{R}$ du point A, et $\mathfrak{R}$ son rayon. Son équation sera, en vertu de la définition de la distance :

$$\sum_s |a_s - n_s| = \mathfrak{R}$$

On voit qu'une sphère est composée de morceaux de multiplicités linéaires.

3. Mécanique ponctuelle dans l'espace (n) . — De même que les équations de Dirac-Fock peuvent être considérées comme les équations canoniques du mouvement d'un certain point de l'espace des fonctions ψ , de même nous regarderons les équations (2) comme les équations canoniques du mouvement d'un certain point N de l'espace (n) , les quantités $n_1, n_2, \dots, n_s, \dots$ étant ses coordonnées rectangulaires.

Les $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_s, \dots$ peuvent être regardés comme les composantes de la quantité de mouvement de N, mais on ne saurait les considérer comme les composantes d'un vecteur Θ , car les θ_s ne sont pas soumis à une condition de convergence telle que la longueur du vecteur Θ soit finie. On peut dire alors si l'on veut que Θ est un pseudo-vecteur : il possède en effet la propriété d'être une grandeur dirigée, mais étant donné que généralement sa longueur n'est pas finie, il n'est pas à proprement parler un vecteur comme au contraire l'est $\overrightarrow{\text{ON}}$.

D'une façon plus générale, nous admettrons que les équations de la dynamique de l'espace (n) peuvent être écrites sous la forme canonique, les n_s étant les coordonnées du

M. Fréchet ⁽²⁵⁾ a démontré que cet espace est un espace ($\mathcal{O}$) *séparable*, que cette distance se prête à une généralisation du critère de Cauchy, et qu'il a bien $\aleph_0$ dimensions.

Nous allons considérer les équations (2) comme les équations du mouvement d'un point N dans cet espace. Des grandeurs mécaniques ayant un caractère vectoriel, nous devons introduire la notion de vecteur dans l'espace (n). Nous sommes dans un cas particulier de l'introduction de vecteurs dans un espace *distancié*, ou espace ($\mathcal{O}$) et cette introduction se fait ici suivant la méthode générale.

M. Fréchet ⁽²⁶⁾ a démontré que l'espace (A) était un espace *vectoriel complet* ou espace de M. Banach, c'est-à-dire que :

1° La longueur d'un vecteur est égale à la distance de ses deux extrémités :

$$\text{distance } \{X, Y\} = \|\vec{XY}\|.$$

2° La condition nécessaire et suffisante pour qu'une suite de points $A_1, A_2, \dots, A_p, \dots$ soit convergente est que la longueur $\|\vec{A_n A_p}\|$ puisse être rendue aussi petite que l'on veut quand n et p sont assez grands.

Il faut remarquer que, dans un tel espace, on a pour trois points quelconques A, B, C :

$$|\|\vec{AC}\| - \|\vec{BC}\|| \leq \|\vec{AB}\| \leq \|\vec{AC}\| + \|\vec{BC}\|$$

et que si les trois points A, B, C sont alignés, l'un des signes d'inégalité peut être supprimé; mais la réciproque n'est pas vraie. La ligne droite n'y est pas nécessairement le plus court chemin d'un point à un autre.

Il est bien évident que, si l'on considère une ligne polygonale A, $A_1, A_2, \dots, A_n, B$ joignant deux points fixes A et B, on aura :

$$\|\vec{AB}\| \leq \|\vec{AA_1}\| + \|\vec{A_1 A_2}\| + \dots + \|\vec{A_n B}\|$$

La longueur AB ne sera supérieure au périmètre d'aucune ligne polygonale joignant A et B, mais il n'est pas impossible qu'elle lui soit égale.

Nous appellerons « sphère » de centre A de coordonnées $a_1, a_2, \dots, a_s, \dots$ dans l'espace (n) la multiplicité lieu des points N de coordonnées $n_1, n_2, \dots, n_s, \dots$ située à une distance constante $\mathcal{R}$ du point A, et $\mathcal{R}$ son rayon. Son équation sera, en vertu de la définition de la distance :

$$\sum_s |a_s - n_s| = \mathcal{R}$$

On voit qu'une sphère est composée de morceaux de multiplicités linéaires.

3. Mécanique ponctuelle dans l'espace (n) . — De même que les équations de Dirac-Fock peuvent être considérées comme les équations canoniques du mouvement d'un certain point de l'espace des fonctions ψ , de même nous regarderons les équations (2) comme les équations canoniques du mouvement d'un certain point N de l'espace (n) , les quantités $n_1, n_2, \dots, n_s, \dots$ étant ses coordonnées rectangulaires.

Les $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_s, \dots$ peuvent être regardés comme les composantes de la quantité de mouvement de N, mais on ne saurait les considérer comme les composantes d'un vecteur Θ , car les θ_s ne sont pas soumis à une condition de convergence telle que la longueur du vecteur Θ soit finie. On peut dire alors si l'on veut que Θ est un pseudo-vecteur : il possède en effet la propriété d'être une grandeur dirigée, mais étant donné que généralement sa longueur n'est pas finie, il n'est pas à proprement parler un vecteur comme au contraire l'est $\overrightarrow{ON}$.

D'une façon plus générale, nous admettrons que les équations de la dynamique de l'espace (n) peuvent être écrites sous la forme canonique, les n_s étant les coordonnées du

Si l'on considère une fonction $f(n_s)$ et que l'on prenne une valeur particulière de n_s et un accroissement $\Delta n_s = 1$, on voit que les termes de la série de Taylor pour cet accroissement sont justement ceux obtenus en appliquant l'opérateur

$e^{\frac{\partial}{\partial n_s}}$ à $f(n_s)$, donc :

$$f(n_s + 1) = e^{\frac{\partial}{\partial n_s}} f(n_s)$$

De même, à la grandeur $e^{+\frac{2\pi i}{h} \theta_s}$ se trouve associé l'opérateur $e^{-\frac{\partial}{\partial n_s}}$ dont les termes de la série seraient ceux qui correspondraient dans la série de Taylor à un accroissement -1 , donc :

$$f(n_s - 1) = e^{-\frac{\partial}{\partial n_s}} f(n_s).$$

Plus généralement, on aurait en comparant à la série de Taylor :

$$f(n_s + k) = e^{-k \frac{\partial}{\partial n_s}} f(n_s).$$

Enfin, $e^{k \frac{\partial}{\partial n_s}}$ et $e^{-k \frac{\partial}{\partial n_s}}$ sont inverses l'un de l'autre.

Pour les grandeurs Y_s et $P_s = \frac{h}{2\pi i} Y_s^*$, plusieurs opérateurs possibles se présentent suivant le choix qu'on adopte pour l'ordre des facteurs lorsqu'on substitue aux variables des opérateurs.

Mais les opérateurs associés $\mathbf{Y}_s$ et $\mathbf{P}_s$ devront, d'une part, satisfaire à la condition de permutation :

$$\mathbf{Y}_r \mathbf{P}_s - \mathbf{P}_s \mathbf{Y}_r = \frac{h}{2\pi i} \delta_{rs}$$

puisque les Y_s et P_s peuvent être considérés comme coordonnées et moments conjugués d'un point de l'espace des

fonctions ψ ; d'autre part, l'un des deux opérateurs $\mathbf{Y}_s \mathbf{P}_s$ ou $\mathbf{P}_s \mathbf{Y}_s$ devra être égal à $\frac{h}{2\pi i} n_s$.

Ces deux conditions peuvent être remplies en prenant, pour définir les opérateurs $\mathbf{Y}_s$ et $\mathbf{P}_s$, dans l'un $\sqrt{n_s}$ comme premier facteur, dans l'autre comme second. $\mathbf{Y}_s$ et $\mathbf{Y}_s^*$ pouvant jouer le même rôle, il est indifférent que ce soit dans l'un ou l'autre que $\sqrt{n_s}$ soit le premier facteur. Nous prendrons comme Fock :

$$\mathbf{Y}_s = e^{\frac{\partial}{\partial n_s}} \sqrt{n_s} \quad \mathbf{P}_s = \frac{h}{2\pi i} \sqrt{n_s} e^{-\frac{\partial}{\partial n_s}} = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{Y}_s.$$

ce qui donne bien la relation de commutation :

$$\mathbf{Y}_r \mathbf{Y}_s^* - \mathbf{Y}_s^* \mathbf{Y}_r = \delta_{rs},$$

et on a :

$$\mathbf{Y}_s \mathbf{Y}_s^* = n_s + 1 \quad \mathbf{Y}_s^* \mathbf{Y}_s = n_s.$$

Pour l'hamiltonien $\mathbf{F}_1$, il n'y a aucune hésitation. Il suffit pour les termes carrés de remplacer dans la fonction hamiltonienne F_1 dont l'expression est donnée par (5) les n_s par les opérateurs n_s , et pour les termes rectangles il n'y a qu'à se reporter à l'opérateur $\mathbf{F}$, les opérateurs $\mathbf{P}_r$ et $\mathbf{Y}_s$ commutant si r est différent de s , d'où l'expression de $\mathbf{F}_1$:

$$\mathbf{F}_1 = \sum k_{ss} n_s + \sum_{r \neq s} k_{rs} e^{-\frac{2\pi i}{h} \theta_s} \sqrt{n_s \cdot n_r} e^{\frac{2\pi i}{h} \theta_r}.$$

L'hamiltonien $\mathbf{F}_1$ dépend du temps, car les K_{rs} en dépendent. L'équation des ondes ψ de l'espace (n) est alors :

$$\mathbf{F}_1 \psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Comme toutes les équations d'ondes, elle contient la première dérivée partielle de ψ par rapport au temps.

Donc, si on se donne la fonction Ψ à l'instant initial, soit Ψ_0 , la fonction Ψ est déterminée.

Mais ce passage de la mécanique ponctuelle à la mécanique ondulatoire de l'espace (n) obtenu par le procédé formel habituel, ne satisfait pas au critère de Louis de Broglie qui veut qu'il existe une approximation de l'optique géométrique avec des solutions de la forme :

$$\Psi = ae^{\frac{2\pi i}{h} \varphi},$$

où a est une constante, et φ une solution de l'équation de Jacobi. Ici, il n'y a pas de contrôle par l'approximation de l'optique géométrique, car l'équation d'ondes n'a pas de solution de cette forme, et le passage à la mécanique ondulatoire (n) est purement formel sans qu'à *priori* on puisse dire s'il est justifié ou non.

Nous devons maintenant chercher à prolonger l'équation d'ondes pour que les fonctions Ψ ne soient pas assujetties à la condition d'être développables en série de Taylor. Nous

obtenons aisément ce prolongement car les opérateurs $e^{\frac{\partial}{\partial n_s}}$ définis seulement pour de telles fonctions peuvent être prolongés par des opérateurs « changement de la valeur de l'argument » de façon à pouvoir opérer sur toutes les fonctions définies dans un certain intervalle de la variable n_s , comme le fait l'opérateur n_s .

Etant donné que $f(n_s + 1) = e^{\frac{\partial}{\partial n_s}} f(n_s)$ nous prolongerons l'opérateur $e^{\frac{\partial}{\partial n_s}}$ par l'opérateur que nous désignerons par $(n_s + 1 | n_s)$ applicable à toutes les fonctions définies pour les valeurs n_s et $n_s + 1$:

$$e(n_s + 1) = (n_s + 1 | n_s) f(n_s),$$

De même pour $e^{-\frac{\partial}{\partial n_s}}$ on aura comme opérateur prolongé $(n_{s-1} \mid n_s)$.

Ceci donne comme hamiltonien prolongé :

$$\mathbf{F}_2 = \sum_s k_{ss} n_s + \sum_{r \neq s} k_{rs} (n_{s+1} \mid n_s) \sqrt{n_s n_r} (n_{r-1} \mid n_r) \quad (6)$$

et pour les opérateurs $\mathbf{Y}_s$ et $\mathbf{P}_s$ nous avons :

$$\mathbf{Y}_s = (n_{s+1} \mid n_s) \sqrt{n_s} ; \quad \mathbf{P}_s = \frac{\hbar}{2\pi i} \mathbf{Y}_s = \frac{\hbar}{2\pi i} \sqrt{n_s} (n_{s-1} \mid n_s).$$

L'équation prolongée des ondes Ψ de l'espace (n) sous forme explicite est :

$$\begin{aligned} & \sum_s k_{ss} n_s \Psi(n_1, \dots, n_r, \dots, n_s, \dots; t) + \\ & + \sum_{r \neq s} k_{rs} \sqrt{(n_s + 1) n_r} \Psi(n_1, \dots, n_r - 1, \dots, n_s + 1, \dots; t) \\ & = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi(n_1, \dots, n_r, \dots, n_s; t)}{\partial t} . \end{aligned}$$

Contrairement aux équations d'ondes que nous avons rencontrées jusqu'ici, il n'y figure aucune dérivée par rapport aux coordonnées mais seulement des variations d'une unité des arguments des fonctions Ψ .

Cette fois, la fonction Ψ , solution de l'équation d'ondes prolongée, n'a plus besoin d'être ni continue, ni dérivable par rapport aux variables d'espace.

5. Théorèmes fondamentaux sur les ondes Ψ de la superquantification. — La théorie de la superquantification a été construite dans le but de ne faire intervenir pour les variables n_s que des valeurs entières ou nulles. Or, au cours des raisonnements que nous avons développés, rien ne permet jusqu'à maintenant de se borner à considérer unique-

ment les valeurs entières pour les n_s . Les théorèmes qui vont suivre ont pour but d'en montrer la possibilité. Ils forment donc le point fondamental de la théorie : on ne saurait trop y insister. Avant d'énoncer le premier théorème, donnons ces deux définitions qui simplifieront le langage :

a) « Ensemble $\mathcal{E}_0$ » attaché à un point N. — Considérons un point N^0 de l'espace (n) de coordonnées $n_1^0, n_2^0, \dots, n_s^0, \dots$. L'ensemble $\mathcal{E}_0$ sera par définition l'ensemble des points dont les coordonnées différeront de celles du point N^0 d'un nombre entier positif ou négatif.

En particulier, nous appellerons *ensemble* $\mathcal{E}$ l'ensemble des points de coordonnées entières ou nulles.

b) *Théorème fondamental 1.* — Les valeurs de la fonctionnelle $\Psi(N, t)$ à l'instant t en un point N d'un ensemble $\mathcal{E}_0$ ne dépendent que des valeurs de la fonctionnelle $\Psi_0(N)$ sur cet ensemble $\mathcal{E}_0$, $\Psi_0(N)$ étant la fonctionnelle $\Psi(N, t)$ à l'instant initial.

Ce théorème, qui peut être démontré de plusieurs façons, résulte du fait qu'au premier membre de l'équation d'ondes figure seulement la fonction $\Psi(N, t)$ avec des variations d'une unité pour les arguments. Nous en donnerons une démonstration complète ultérieurement en utilisant l'opérateur $\mathcal{U}$ que nous avons défini ailleurs ⁽²⁷⁾. Cependant, nous pouvons indiquer d'ores et déjà une méthode directe de démonstration : Supposons qu'à un instant t les valeurs de la fonction $\Psi(N, t)$ sur $\mathcal{E}_0$ ne dépendent que des valeurs de $\Psi_0(N)$ sur cet ensemble. En vertu de l'équation d'ondes, à un instant postérieur $t_1 + dt$ la fonctionnelle $\Psi(N, t)$ au même point N a subi un accroissement $d\Psi$ et on a :

$$d\Psi = \frac{2\pi i}{h} \mathbf{F}_2 \Psi(N, t) dt.$$

Mais, en vertu de la forme de $\mathbf{F}_2$, les valeurs de $\mathbf{F}_2 \Psi$ sur $\mathcal{E}_0$ ne dépendent que de celles de Ψ_0 , donc aussi celles

de $d\psi$ et celles de $\psi(N, t_1 + dt)$ puisque, au second ordre près :

$$\psi(N, t_1 + dt) \doteq \psi(N, t_1) + d\psi.$$

Nous pouvons recommencer le raisonnement en prenant cette fois, au lieu de t_1 , l'instant $t_1 + dt_1$ et ainsi de proche en proche, on démontrera que les valeurs de $\psi(N, t)$ sur $\mathcal{E}_0$ ne dépendront que de celle de ψ_0 aux instants $t_1 + dt_1$, $t_1 + dt_1 + dt_2$, ..., $t_1 + dt_1 + dt_2 + \dots + dt_n$.

En particulier, si on prend $t_1 = t_0$ la fonctionnelle $\psi(N, t_1)$ se réduit à $\psi_0(N)$, donc il existe au moins un instant où les valeurs de $\psi(N, t)$ sur $\mathcal{E}_0$ ne dépendent que de celle de ψ_0 . En vertu de ce qui précède, il en sera de même aux instants $t_0 + dt_1$, $t_0 + dt_1 + dt_2$, ..., $t_0 + dt_1 + dt_2 + \dots + dt_n$. Les accroissements $dt_1, dt_2, \dots, dt_n$ étant arbitraires, on voit que la propriété a lieu à tout instant.

c) *Corollaire.* — Si nous prenons comme fonctionnelle $\psi_0(N)$ la fonctionnelle suivante : $\psi_0(N)$ est nulle partout sauf sur l'ensemble $\mathcal{E}$ des points de coordonnées entières ou nulles, la fonction $\psi(N, t)$ sera également nulle partout sauf sur l'ensemble $\mathcal{E}$.

d) Physiquement, le point N doit être tel que ses coordonnées soient entières, positives ou nulles, et être sur la sphère (S) pour que $\mathcal{X} = \Sigma_s n_s$. Il doit satisfaire à tout instant à cette condition. Le théorème suivant va en montrer la possibilité. Pour abrégé, nous appellerons $\mathcal{E}_s$ l'ensemble des points de coordonnées entières, positives ou nulles qui sont sur la sphère (S) .

Théorème 2. — Si, à l'instant initial, la fonctionnelle $\psi(N, t)$ est nulle partout sauf sur $\mathcal{E}_s$, elle possède cette propriété à tout instant.

On peut le démontrer rigoureusement en utilisant notre opérateur $\mathcal{U}$, mais on peut aussi procéder suivant la même méthode que celle utilisée pour le théorème 1 :

Posons :

$$\chi = \mathbf{F}_2 \Psi \quad ; \quad d\Psi = \frac{2\pi i}{h} \chi dt.$$

A l'instant initial on a alors :

$$\begin{aligned} \chi(n_1, n_2, \dots, n_s, \dots; t_0) &= \sum_s K_{ss} n_s \Psi(n_1, \dots, n_r, \dots, n_s, \dots; t_0) \\ &+ \sum_{r \neq s} K_{rs} \sqrt{(n_s + 1)n_r} \Psi(n_1, \dots, n_r - 1, \dots, n_s + 1, \dots; t_0) \end{aligned}$$

$\Psi(n_1, \dots, n_s; \dots; t_0)$ est nul partout sauf sur $\mathcal{E}_s$. On voit d'abord que l'application d'un terme de l'opérateur $\mathbf{F}_2$ à Ψ donne une fonctionnelle nulle en dehors de $\mathcal{E}_s$ car la fonctionnelle obtenue est proportionnelle à la valeur de Ψ en un autre point de $\mathcal{E}_s$. Un seul cas pourrait sembler en défaut, c'est si l'on avait $n_s = -1$ ou $n_r = 0$, de sorte que pour un terme en r, s on aurait une valeur de Ψ non nulle, mais alors le radical $\sqrt{(n_s + 1)n_r}$ est nul. En faisant la somme pour les différents termes la propriété subsiste ; donc à $t = t_0$, χ est nul partout sauf sur $\mathcal{E}_s$; il en est de même de $d\Psi$ et de Ψ à l'instant dt ; en recommençant le raisonnement n fois, on démontrerait que la fonctionnelle Ψ est nulle partout sauf sur $\mathcal{E}_s$ aux instants $t_0 + dt_1, t_0 + dt_1 + dt_2, \dots, t_0 + dt_1 + dt_2 + \dots + dt_n, \dots$. Les accroissements $dt_1, dt_2, \dots, dt_n, \dots$ étant arbitraires, on voit que la propriété a lieu à tout instant.

e) *Théorème 3. — L'ensemble $\mathcal{E}_+$ des points de l'espace (n) de coordonnées entières et positives ou nulles est dénombrable.*

En effet, pour chaque point de $\mathcal{E}_+$, la série des coordonnées étant convergente et chaque n_s étant entier positif ou nul, on est sûr qu'à partir d'un certain rang les coordonnées seront nulles. Dès lors, on peut décomposer l'ensemble $\mathcal{E}_+$ en une suite d'ensembles finis : si nous désignons par E_p le sous-ensemble de $\mathcal{E}_+$ formé par les points dont toutes les coordonnées au delà du rang p sont nulles

sans que la p^e le soit, nous voyons que les ensembles E_p sont disjoints et forment une suite qui épuise le contenu $\mathcal{E}_+$. D'autre part, les n_s étant inférieurs ou au plus égaux à la somme de la série Σn_s , les ensembles E_p sont finis. On peut alors fixer un numéro d'ordre à chaque élément de $\mathcal{E}_+$: cet ensemble est donc dénombrable.

f) *Corollaire 1. L'ensemble $\mathcal{E}_s$ est dénombrable.* — En effet, $\mathcal{E}_s$ est le sous-ensemble de $\mathcal{E}_+$ formé par les points de $\mathcal{E}_+$ qui appartiennent à la sphère (S).

Notons que le nombre $\mathcal{N}$ égal à la somme de la série des n_s peut être pris aussi grand qu'on veut, mais fini. Cette remarque n'est pas inutile, car dans le cas d'une assemblée de photons leur nombre $\mathcal{N}$ a été pris infini par certains auteurs, alors que l'on doit le supposer très grand mais fini pour que $\mathcal{E}_s$ soit dénombrable.

g) *Corollaire 2.* — Si l'on considère une fonctionnelle $\Psi(N, t)$ nulle partout sauf sur $\mathcal{E}_s$, comme $\mathcal{E}_s$ est dénombrable, la somme des modules de ses valeurs pour les différents points peut être finie sans que presque toutes ses valeurs soient nulles.

h) *Théorème 4.* — *La somme des carrés des modules des différentes valeurs de la fonctionnelle Ψ sur l'ensemble $\mathcal{E}_s$ est constante :*

$$\sum_x |\Psi(N_x, t)|^2 = \text{Cte.}$$

Si cette somme $\mathcal{E}_s$ est constante, la dérivée par rapport au temps doit être nulle, c'est-à-dire qu'on a :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_x |\Psi(N_x, t)|^2 &= \sum \Psi^*(N_x, t) \frac{d\Psi(N_x, t)}{dt} + \\ &+ \Psi(N_x, t) \frac{d^*\Psi(N_x, t)}{dt} = 0. \end{aligned}$$

En vertu de l'équation d'ondes et de sa conjuguée, et du fait que le point N_α ne dépend pas du temps, on a :

$$\frac{d}{dt} \sum_{\alpha} |\Psi(N_\alpha, t)|^2 = \frac{2\pi i}{h} \sum_{\alpha} [\Psi^*(N_\alpha, t) \mathbf{F}_2 \Psi(N_\alpha, t) - \Psi(N_\alpha, t) \mathbf{F}_2^* \Psi^*(N_\alpha, t)].$$

En écrivant explicitement les fonctionnelles $\mathbf{F}_2 \Psi$ et $\mathbf{F}_2^* \Psi^*$ on constate que les termes de coefficient K_{ss} disparaissent ; il reste :

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \sum_{\alpha} |\Psi(N_\alpha, t)|^2 = \\ & = \frac{2\pi i}{h} \left[\sum_{n_1 \dots n_r \dots n_s \dots} \Psi^*(n_1, \dots, n_r, \dots, n_s, \dots; t) \sum_{r \neq s} K_{rs} \sqrt{(n_s + 1)n_r} \right. \\ & \times \Psi(n_1, \dots, n_r - 1, \dots, n_s + 1, \dots; t) \\ & - \sum_{n_1 \dots n_r \dots n_s \dots} \Psi(n_1, \dots, n_r, \dots, n_s, \dots; t) \\ & \times \sum_{r \neq s} K_{rs}^* \sqrt{(n_s + 1)n_r} \Psi^*(n_1, \dots, n_r - 1, \dots, n_s + 1, \dots; t) \left. \right]. \end{aligned}$$

Nous allons transformer le second terme pour montrer qu'il est égal au premier. Pour cela, permutons les indices de sommation r et s , ce qui donne :

$$\begin{aligned} & \sum_{n_1, \dots, n_r, \dots, n_s, \dots} \Psi(n_1, \dots, n_r, \dots, n_s, \dots; t) \\ & \times \sum_{s \neq r} K_{sr}^* \sqrt{(n_r + 1)n_s} \Psi^*(n_1, \dots, n_r + 1, \dots, n_s - 1; \dots, t). \end{aligned}$$

Puis changeons les indices n_r et n_s de la première sommation respectivement en $n_r - 1$ et $n_s + 1$. On a alors :

$$\begin{aligned} & \sum_{n_1 \dots n_r + 1 \dots n_s - 1} \Psi(n_1, \dots, n_r - 1, \dots, n_s + 1, \dots; t) \\ & \times \sum_{s \neq r} K_{sr}^* \sqrt{n_r(n_s + 1)} \Psi^*(n_1, \dots, n_r, \dots, n_s, \dots; t). \end{aligned}$$

La première sommation se trouve toujours être une sommation pour tous les points N_α de $\mathcal{E}_s$, et la somme est bien égale à celle écrite à la ligne qui précède.

Mais sous cette forme on voit que le second terme est égal au premier en vertu de l'hermiticité de la matrice K ; donc on a :

$$\sum_{N_\alpha} [\Psi^*(N_\alpha, t) F \Psi(N_\alpha, t) - \Psi(N_\alpha, t) F^* \Psi^*(N_\alpha, t)] = 0$$

et $\sum |\Psi(N_\alpha, t)|^2$ est bien constant.

Comme la fonctionnelle $\Psi(N, t)$ est définie à une constante multiplicative près, on peut la choisir de façon que cette dernière somme soit égale à l'unité.

6. Sens physique des ondes Ψ . — Les théorèmes qui précèdent nous autorisent à accepter le principe suivant, que Dirac fut le premier à énoncer, mais sous une forme moins rigoureuse :

« Si $\Psi(N, t)$ est une fonctionnelle satisfaisant à l'équation d'ondes et nulle partout sauf sur $\mathcal{E}_s$, le carré du module de sa valeur en un point N_i , soit $|\Psi(N_i, t)|^2$ mesure à l'instant t la probabilité pour que le point figuratif de la répartition des systèmes soit en N_i à cet instant. »

Pour accepter ce principe, il faut encore, en vertu du principe des probabilités totales, que la somme pour tous les points de $\mathcal{E}_s$ du carré du module de la valeur de Ψ en ces points soit constamment égale à l'unité. Mais d'après le théorème 4, si cette propriété a lieu à un instant, elle a lieu à tout instant. Une fonction Ψ n'étant définie qu'à une constante multiplicative près, il suffit qu'elle soit choisie pour remplir cette condition à l'instant initial. Nous dirons alors qu'elle est normée.

Le sens physique qu'on attribue ainsi à la fonction Ψ cor-

respond au principe des interférences, et les restrictions imposées aux fonctions Ψ solution de l'équation d'ondes correspondent au principe de quantification.

En effet, si l'on pose comme principe de quantification que l'on n'acceptera comme fonction propre d'un opérateur que les fonctions nulles en dehors de $\mathcal{E}_s$, on voit qu'à l'opérateur n_s correspondent les fonctions propres δ_i :

$$n_s \delta_i(n_s) = n_{s,i} \delta_i(n_s)$$

qui doivent être nulles en dehors de $\mathcal{E}_s$; les seules fonctions propres sont donc :

$$\delta_i(n_s) = \begin{cases} 0 & \text{si } n_s \neq n_{s,i} \\ 1 & \text{si } n_s = n_{s,i} \end{cases}$$

$n_{s,i}$ étant la i^e valeur propre de n_s égale à 1, 2, ... i , ... On se trouve conduit pour les grandeurs n_s au principe de décomposition spectrale.

Si nous considérons la grandeur répartition $\mathbf{R} = \prod_s n_s$

qui est le produit des opérateurs n_s , on vérifie aisément, en vertu de la commutabilité des n_s entre eux, que ses fonctions propres sont le produit des fonctions propres, et les valeurs propres les produits des valeurs propres des différents opérateurs n_s .

Si nous désignons par $\mathcal{U}_x$ la x^e valeur propre, nous avons :

$$\mathcal{U}_x = \prod_{s=1}^{\infty} \delta_{i_s}(n_s).$$

On voit alors que :

$$\mathcal{U}_x(N) = \begin{cases} 0 & \text{pour } N \neq N_x \\ 1 & \text{pour } N = N_x \end{cases}$$

et :

$$\mathcal{U}_x \mathcal{U}_\beta = \delta_{x\beta}.$$

Si l'on désigne par Ψ_x la valeur de Ψ au point N_x , on peut écrire :

$$\Psi = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha} U_{\alpha}$$

la sommation par rapport à α étant étendue à tous les points N_x de l'ensemble $\mathcal{E}_s$. On peut alors considérer les U_{α} comme formant un système de base complet pour les fonctions Ψ . Le principe de décomposition spectrale appliqué à la grandeur $\mathbf{R}$ nous indique que $\Psi_{\alpha} \Psi_x^*$ est la probabilité pour que l'on trouve le point figuratif N au point N_x . C'est justement là le principe de Dirac. Il se réduit donc au principe de décomposition spectrale quand on prend comme opérateur l'opérateur produit des coordonnées, or c'est là le principe des interférences.

7. Espace des fonctions Ψ ou espace (Ψ_N) . — Nous pouvons considérer les fonctions $\Psi(N, t)$ comme des éléments d'un espace fonctionnel, comme nous l'avions fait pour les fonctions d'ondes des mécaniques ondulatoires usuelles. Les fonctions Ψ ont pour propriétés, outre d'être solutions de l'équation d'ondes, d'être nulles en dehors des points de l'ensemble $\mathcal{E}_s$ et d'avoir $\sum_{\alpha} \Psi_{\alpha} \Psi_{\alpha}^* = 1$, la valeur de Ψ au α^e point N_{α} de $\mathcal{E}_s$ étant Ψ_{α} .

Les fonctions U_x pouvant être considérées comme formant un système de base complet pour les fonctions Ψ , nous sommes amené à dire, d'après le sens physique attribué à $\Psi_{\alpha} \Psi_{\alpha}^*$, que deux fonctions Ψ et χ sont infiniment voisines si elles définissent des états infiniment voisins, c'est-à-dire des probabilités de répartitions infiniment voisines. Ceci nous conduit à définir le voisinage de deux fonctions Ψ et χ par le voisinage de leurs valeurs Ψ_{α} et χ_{α} au point N_{α} qui peut être

exprimé par l'intermédiaire d'une distance en prenant :

$$\text{distance } \{ \Psi, \chi \} = \sqrt{\sum_{\alpha} (\Psi_{\alpha} - \chi_{\alpha})(\Psi_{\alpha}^* - \chi_{\alpha}^*)}.$$

Nous sommes ainsi autorisé à admettre que les fonctions Ψ appartiennent à l'espace des fonctions de point de l'espace (n) , nulles en dehors de $\mathcal{E}_s$, dont la somme des carrés des modules des valeurs $\sum \Psi_{\alpha} \Psi_{\alpha}^*$ converge, et dont la distance de deux éléments est exprimée par la formule ci-dessus. Les Ψ sont alors sur la sphère de rayon unité centrée à l'origine.

Appelons coordonnées de Ψ dans le système des $\mathcal{U}_{\alpha}$ les Ψ_{α} . Nous dirons par définition que :

1° $\Psi + \chi$ est l'élément de coordonnées $\Psi_{\alpha} + \chi_{\alpha}$.

2° $a\Psi$, où a est un nombre complexe est l'élément de coordonnées $a\Psi_{\alpha}$.

3° L'élément zéro est celui de coordonnées toutes nulles,

4° Le produit scalaire de deux éléments Ψ, χ est :

$$(\Psi, \chi) = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}^* \chi_{\alpha}$$

il existe, en vertu de l'inégalité de Schwarz, puisque (Ψ, Ψ) et (χ, χ) existent.

On vérifie aisément que cet espace, que nous désignerons par (Ψ_s) , est un espace de Hilbert et est applicable sur l'espace $(\mathcal{A}_0)$, les $\mathcal{U}_{\alpha}$ jouant le rôle de système de base.

Ainsi donc, ici encore, les fonctions d'ondes appartiennent à un espace de Hilbert.

Les opérateurs qui correspondent à une grandeur physique : l'hamiltonien $\mathbf{F}$, les $\mathbf{n}_s$ et $\mathbf{R}$ satisfont aussi aux cinq conditions de la page 24 auxquelles sont soumis les opérateurs de la mécanique simple. Au contraire, les opérateurs

$\mathbf{e}^{\pm \frac{h}{2\pi i} \theta_s}$ qui ne correspondent pas à une grandeur

physique n'y satisfont pas. Quant aux opérateurs θ_s , ils ne peuvent opérer sur les fonctions Ψ qui ne sont pas dérivables.

Nous retrouvons par conséquent les mêmes traits principaux pour la mécanique ondulatoire (n) que pour les mécaniques ondulatoires usuelles : une équation d'ondes, un hamiltonien, un espace de Hilbert pour les fonctions d'ondes, les principes de quantification et le principe de décomposition spectrale avec le cas particulier du principe des interférences.

8. Extension de la théorie au cas de systèmes obéissant à la statistique de Fermi-Dirac. — La théorie précédente s'est montrée valable pour les systèmes satisfaisant à la statistique de Bose-Einstein. Dans le cas particulier où les systèmes que l'on considère se réduisent à une particule unique, et que la grandeur par rapport à laquelle on cherche les répartitions est l'énergie, la méthode de la Superquantification a pu être étendue par Jordan et Wigner ⁽²⁸⁾, puis par Fock ⁽²¹⁾, au cas d'une assemblée de particules obéissant à la statistique de Fermi-Dirac.

La voie que Fock a suivie lui a permis de traiter aussi par la Superquantification le cas d'une assemblée de particules obéissant à l'une des deux statistiques lorsque deux quelconques d'entre elles sont en interaction. Sa méthode présente grand intérêt, mais nous n'entrerons pas dans son détail car, ne faisant pas appel à des raisonnements de mécanique abstraite, elle nous entraînerait hors du cadre que nous nous sommes fixé. Elle conduit à modifier la définition de l'hamiltonien de la mécanique ondulatoire (n).

Nous pouvons n'avoir qu'un seul groupe de formules pour les deux cas de statistiques, en modifiant seulement les définitions des opérateurs $\mathbf{Y}_s$ et $\mathbf{Y}_{s'}$: il nous suffit de poser :

$$\mathbf{Y}_s = (n_s + 1 \mid n_s) \mathbf{v}(n_s) \quad \mathbf{Y}_{s'} = \mathbf{v}_*(n_s) (n_s - 1 \mid n_s)$$

$\nu(n_s)$ et $\nu_*(n_s)$ caractérisant la statistique et étant tels que :

$$\nu(n_s) = \begin{cases} \sqrt{n_s} & n_s \neq 0 \\ 0 & n_s = 0 \end{cases} \quad \nu_*(n_s) = \begin{cases} \sqrt{n_s} & n_s \neq 1 \\ \nu_s & n_s = 1 \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{Bose-Einstein} \\ \text{Fermi-Dirac} \end{matrix}$$

ν_s étant la fonction de Wigner égale à $+1$ ou à -1 , et définie par :

$$\nu_s = \prod_{p=1}^s (1 - 2n_p).$$

L'hamiltonien généralisé de l'équation des ondes de l'espace (n) a alors pour expression :

$$\mathbf{F}_3 = \sum_{rs} K_{rs} \nu_*(n_r) \binom{n_r-1}{\cdot} \binom{n_s+1}{\cdot} \nu(n_s).$$

Lorsqu'on se trouve dans le cas d'interactions entre les particules de l'assemblée deux à deux avec un potentiel d'interaction G indépendant des deux particules considérées, c'est-à-dire si G est de la forme $G(A_i, A_j)$ si A_i et A_j sont les deux points de l'espace physique figurant la i^e et la j^e particule (d'ailleurs toutes identiques entre elles), Fock trouve que l'hamiltonien dans les deux cas de statistique, a la forme suivante :

$$\mathbf{F}_4 = \mathbf{F}_3 + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} G_{pq,rs} \nu_*(n_p) \binom{n_p-1}{\cdot} \binom{n_q}{\cdot} \nu_*(n_q) \times \binom{n_q-1}{\cdot} \binom{n_q}{\cdot} \binom{n_r+1}{\cdot} \binom{n_r}{\cdot} \nu(n_r) \binom{n_s+1}{\cdot} \binom{n_s}{\cdot} \nu(n_s). \quad (7)$$

$G_{pq,rs}$ étant un élément de matrice formé à partir de la fonction G .

Le théorème fondamental 2 doit être étendu aux cas de ces hamiltoniens $\mathbf{F}_3$ et $\mathbf{F}_4$. Dans le cas de la statistique de Bose-Einstein on vérifie que $\Psi(N, t)$ est nul en dehors de $\mathcal{S}_s$ lorsque l'hamiltonien est $\mathbf{F}_4$. Dans le cas de la statistique de

Fermi-Dirac, si on désigne par $\mathcal{E}_{s1}$ le sous-ensemble de $\mathcal{E}_s$ formé des points dont les diverses coordonnées sont 0 ou 1, on vérifie de suite pour les hamiltoniens $\mathbf{F}_3$ et $\mathbf{F}_4$ que si $\Psi(\mathbf{N}, t)$ est nul en dehors de l'ensemble $\mathcal{E}_{s1}$. On peut encore développer Ψ dans le système des Ψ_α ,

$$\Psi = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha} \Psi_{\alpha},$$

comme dans le premier cas, seulement Ψ_{α} est nul pour tout point $\mathbf{N}_{\alpha}$ en dehors de $\mathcal{E}_{s1}$.

Les extensions de la méthode se bornent donc, en définitive, à modifier l'expression de l'hamiltonien primitif.

9. Concepts et postulats de la superquantification exprimés à l'aide de la Mécanique Ondulatoire (n). — La Mécanique Ondulatoire (n) considérée au point de vue abstrait forme un système logique indépendant comme les autres mécaniques ondulatoires. Mais, en plus, elle possède un sens physique qui lui est donné par la théorie de la superquantification. Sous ce premier point de vue, nous pouvons considérer que cette théorie a pour armature formelle la mécanique ondulatoire (n). Aussi, nous pouvons, pour donner pleine indépendance à la superquantification, diviser les concepts et postulats en deux groupes : ceux qui ont trait à la mécanique (n) et ceux qui en sont indépendants. Voici d'abord ces derniers : ce ne sont autres que ceux des groupes A, B des mécaniques ondulatoires usuelles. Nous pouvons les résumer ainsi :

Groupe I. — 1^o Concept « système mécanique ».

2^o Concept « grandeur mécanique attachée à un système ».

3^o *Postulat 1* ou *Principe de quantification*. — a) Une grandeur mécanique ne peut prendre que certaines valeurs réelles, dites valeurs propres ; b) Elles se composent d'un ensemble infini dénombrable, fini ou vide, et d'un ensemble continu qui peut être éventuellement vide.

En décomposant les intervalles du spectre continu en un ensemble dénombrable d'intervalles infiniment étroits, on peut caractériser alors toutes les valeurs propres du spectre discontinu, et les intervalles ainsi fournis dans le spectre continu par un nombre entier.

4° *Définition*. — Lorsqu'une grandeur A attachée au système mécanique aura la n° valeur propre, ou une valeur de l'intervalle $\Delta\alpha_n$ nous dirons que le « système est dans le n° état par rapport à la grandeur A ».

Nous n'aurons pas besoin de préciser ici la façon dont on obtient les valeurs propres, car il faudrait énoncer complètement les postulats A et B .

Passons au second groupe de postulats, qui sont ceux de la mécanique (n) :

Groupe II A. 1° Soit une assemblée de $\mathcal{N}$ systèmes identiques. Une grandeur mécanique étant choisie, on considère le nombre de systèmes dans les divers états comme les coordonnées d'un point abstrait.

2° *Postulat 1*. — Le point abstrait N attaché à la répartition des systèmes se meut dans l'espace (n).

B. 3° *Définition*. — On appelle « grandeur de répartition » attachée à un ensemble mécanique toute grandeur caractérisant le nombre de systèmes dans certains états.

4° *Postulat 2*. — A toute grandeur de répartition correspond un opérateur linéaire formé à partir des variables coordonnées du point figuratif N .

5° *Définition*. — On appelle « valeur propre » d'un opérateur de répartition B un nombre β tel que :

$$B\varphi_{\beta} = \beta\varphi_{\beta}.$$

φ_{β} étant une fonction des variables coordonnées du point N , et soumises aux conditions du postulat 3.

6° *Postulat 3. Premier principe de superquantifica-*

tion. — Les fonctions propres des opérateurs de répartition doivent satisfaire aux conditions suivantes :

- a) être uniformes ;
- b) être nulles en dehors de l'ensemble $\mathcal{E}_+$ des points de coordonnées entières positives ou nulles de l'espace (n) ;
- c) la somme des carrés des modules de leurs valeurs aux différents points de $\mathcal{E}_+$ être finie.

7° ayant imposé ces conditions aux fonctions propres, on voit qu'elles appartiennent à l'espace (Ψ_N) , et les opérateurs de répartition peuvent être considérés comme des opérateurs de l'espace (Ψ_N) . Nous admettrons alors le postulat suivant :

Postulat 4. — Un opérateur de répartition **B** satisfait à ces conditions :

- a) c'est un opérateur linéaire de l'espace (Ψ_N) ;
- b) il est hermitique ;
- c) il possède un spectre tel que les fonctions propres forment un système de base complet pour les fonctions de l'espace (Ψ_N) des variables intéressant l'opérateur **B**.

8° *Postulat 5. Deuxième principe de superquantification ou principe des valeurs propres.* — A un instant t , la valeur d'une grandeur de répartition est nécessairement une des valeurs propres à cet instant de l'opérateur correspondant.

C. 9° *Postulat 6.* — L'état d'une assemblée de systèmes est à chaque instant t représenté par une fonction du point figuratif **N** et du temps nulle en dehors de l'ensemble $\mathcal{E}_s$, dont la somme des carrés des modules des valeurs aux différents points de $\mathcal{E}_s$ est égale à l'unité, appelée « fonction d'ondes » solution de l'équation :

$$\mathbf{F}\Psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t},$$

F étant l'hamiltonien et h la constante de Planck.

D. 10° Soient n_s les coordonnées du point **N** et $n_i, \dots, n_k$ celles qui intéressent l'opérateur **B** considéré, $\beta(t)$ ses

valeurs propres, $\varphi_{\beta}(t)$ ses fonctions propres. Soit $\Psi_{\mathbf{B}}$ la fonction obtenue lorsque l'on somme la fonction d'ondes ψ par rapport à toutes les variables qui n'intéressent pas l'opérateur $\mathbf{B}$, la sommation étant étendue à l'ensemble des valeurs que peuvent prendre ces variables :

$$\Psi_{\mathbf{B}}(n_i, \dots, n_k; t) = \sum_{\substack{n_1 \dots n_{i-1} \\ n_{k+1} \dots n_s, \dots}} \Psi(n_1, \dots, n_i, \dots, n_k, \dots, n_s, \dots; t).$$

Les fonctions propres formant un système complet pour les fonctions de l'espace (Ψ_N) fonctions des variables intéressant $\mathbf{B}$, on peut développer $\Psi_{\mathbf{B}}$ sous la forme :

$$\Psi_{\mathbf{B}}(n_i, \dots, n_k; t) = \sum_{\lambda} c_{\lambda}(t) \varphi_{\lambda}(n_i, \dots, n_k(t)).$$

Nous admettrons alors le postulat suivant :

Postulat 7 ou Principe de décomposition spectrale : La probabilité pour qu'une mesure faite à l'instant t fournisse pour la grandeur $\mathbf{B}$ la valeur $\beta(t)$ est $c_{\beta}(t) \cdot c_{\beta}^*(t)$.

11° *Définitions*. a) On appelle « opérateur coordonnée n_j » l'opérateur multiplication par la j° coordonnée n_j du point figuratif $\mathbf{N}$:

$$n_j = n_j.$$

b) On appelle « opérateur moment conjugué » de la coordonnée n_j l'opérateur θ_j :

$$\theta_j = - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial n_j}.$$

c) D'après ces définitions, à tout point figuratif $\mathbf{N}$ se trouvent attachés deux opérateurs vectoriels :

1° l'opérateur coordonnée $\vec{\mathbf{Q}}$ dont les composantes sont les opérateurs n_j ;

2° l'opérateur « quantité de mouvement $\vec{\theta}$ », dont les composantes sont les opérateurs θ_j .

d) Les autres opérateurs utilisés sont des fonctions des opérateurs n_i et θ_j : parmi eux citons :

1° l'opérateur répartition $\mathbf{R}$ qui est le produit de tous les opérateurs n_j ;

2° les opérateurs $e^{\pm \frac{2\pi i}{h} \theta_j}$ qui sont prolongés par les opérateurs $(n_j \pm 1 | n_j)$.

12° *Postulat 8.* — L'opérateur hamiltonien $\mathbf{F}$ de l'équation d'ondes est :

a) dans le cas d'une assemblée de systèmes quelconques obéissant à la statistique de Bose-Einstein, l'opérateur $\mathbf{F}$, défini plus haut (eq. 6).

b) dans le cas d'une assemblée de systèmes formés d'une seule particule, qui peuvent être en interaction deux à deux et lorsqu'on se borne à considérer comme grandeur mécanique l'énergie, l'opérateur $\mathbf{F}_4$ défini plus haut (eq. 7).

13° *Postulat 9.* — L'opérateur coordonnée n_j est l'opérateur correspondant au « nombre de systèmes dans l'état j ».

Il s'ensuit que l'opérateur $\mathbf{R}$ est celui qui correspond à la répartition des systèmes dans les divers états.

On voit que les opérateurs de répartition sont des opérateurs de la mécanique ondulatoire (n).

Les opérateurs θ_s ou $e^{\pm \frac{h}{2\pi i} \theta_s}$ ne correspondent à aucune grandeur physique, car ils ne satisfont pas au postulat 4.

Dans ces deux groupes de concepts et postulats, nous pensons avoir énoncé les principes de la théorie de la Superquantification en utilisant la mécanique ondulatoire (n).

10. *Remarques générales sur la mécanique (n).* --- Les résultats où l'on est conduit sont en accord avec l'expérience et avec la mécanique ondulatoire usuelle. Mais la méthode de la superquantification semble sous cette forme bien arti-

cielle. Les principales critiques que l'on peut lui adresser sont d'abord :

1° qu'on considère Θ comme représentant la quantité de mouvement dans l'espace (n), alors que Θ n'est pas un vecteur mais un pseudo-vecteur ;

2° que les changements de coordonnées dans l'espace (n) n'ont pas de sens physique, tandis que ce sont des transformations de contact qui en ont un ;

3° lorsqu'on passe à la mécanique ondulatoire, il apparaît alors comme bien incertain de remplacer θ_s par l'opérateur $-\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial n_s}$ puisque les θ_s ne possèdent pas tous les caractères de composantes d'un vecteur quantité de mouvement ;

4° il n'existe pas une approximation du genre de l'optique géométrique pour contrôler si le passage à la mécanique ondulatoire est correct ;

5° l'extension pour des assemblées de particules identiques obéissant à la statistique de Fermi-Dirac, ou pour des assemblées de particules en interaction ne s'explique pas par cette méthode.

Pourtant, grâce aux théorèmes fondamentaux sur les fonctions Ψ , on arrive à n'avoir que des valeurs propres entières pour les opérateurs n_s , ce qui était en somme le but cherché. On y est parvenu en raisonnant continuellement par analogie. Mais on doit reconnaître que, sous cette forme, il semble que ce soit par un hasard heureux que l'on réussisse à donner un sens physique à la mécanique ondulatoire (n), et que l'on puisse faire un tableau de l'évolution d'une assemblée de systèmes analogues au tableau que constitue la mécanique ondulatoire pour l'évolution d'un système de corpuscules. Par la méthode de l'espace (ψ) que nous allons développer, nous allons voir beaucoup plus clairement apparaître les raisons de cette réussite.

CHAPITRE VI

Superquantification et Mécanique ondulatoire dans l'espace (ψ) .

Nous allons maintenant chercher à arriver à la superquantification par la deuxième méthode, qui s'appuie sur une mécanique ondulatoire de l'espace (ψ) .

1. Retour à la mécanique ponctuelle (ψ) . — Revenons à la mécanique ponctuelle de l'espace (ψ) . En partant des résultats obtenus et en effectuant une homothétie de rapport $\sqrt{\mathfrak{K}}$ et de centre O, on constate que le point M de l'espace (ψ) défini par $\overrightarrow{OM} = \sqrt{\mathfrak{K}}\psi(t)$ a son mouvement régi par un principe d'Hamilton, et que sa quantité de mouvement $\overrightarrow{P}$ est égale à :

$$\overrightarrow{P} = \frac{h}{2\pi i} \sqrt{\mathfrak{K}} \psi(^*t).$$

Nous avons vu que $\overrightarrow{OM}$ et $\overrightarrow{P}$ étant des vecteurs de l'espace (ψ) si l'on considère leurs composantes Y_r et P_r dans un système de base quelconque, elles satisfont à des équations canoniques :

$$\frac{dY_r}{dt} = \frac{\partial F}{\partial P_r} \qquad \frac{dP_r}{dt} = - \frac{\partial F}{\partial Y_r}$$

la fonction hamiltonienne étant :

$$F = \frac{2\pi i}{h} \sum K_{rs} Y_s P_r,$$

Aux équations canoniques correspond une équation de Jacobi qui s'obtiendra en effectuant un changement de variables canoniques tel que le nouvel hamiltonien soit identiquement nul, ce qui donne comme en mécanique classique :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = F(\dots, Y_i, \dots; \dots - \frac{\partial S}{\partial Y_i}, \dots; t)$$

ou, sous forme explicite :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = - \frac{\pi i}{h} \sum_{sr} K_{sr} Y_s \frac{\partial S}{\partial Y_r}.$$

Si l'on connaît une intégrale S de cette équation, on obtiendra les moments comme en mécanique classique par :

$$P_i = - \frac{\partial S}{\partial Y_i}.$$

En appelant grad S le vecteur de l'espace (ψ) dont les composantes sont les $\frac{\partial S}{\partial Y_i}$, on a sous forme vectorielle :

$$\vec{P} = - \text{grad } S.$$

Considérons les surfaces $S = C^{\text{te}}$. Un déplacement sur cette surface satisfait à :

$$\sum \frac{\partial S}{\partial Y_i} \delta Y_i = 0,$$

c'est-à-dire que δM^* sera orthogonal à grad S et δM à grad S^* dont les composantes sont $\frac{\partial S^*}{\partial Y_i}$. Le gradient de S^* se trouve donc normal aux surfaces $S = C^{\text{te}}$, et le gradient de S aux surfaces $S^* = C^{\text{te}}$ de même que le vecteur quantité de mouvement $\vec{P}$ se trouve normal aux surfaces $S^* = C^{\text{te}}$ et le vecteur coordonnée $\sqrt{2\pi} \psi$ se trouve normal aux surfaces $S = C^{\text{te}}$. Comme $\vec{P} = \frac{h}{2\pi i} \sqrt{2\pi} \psi^*$ et que ψ est normé, la longueur de $\vec{P}$ est égale à $\frac{h}{2\pi} \sqrt{2\pi}$, donc aussi celle de grad S .

En généralisant la notion de parallélisme de deux surfaces aux multiplicités de l'espace (ψ) , on voit que les surfaces $S = C^t$ à un instant t sont toutes parallèles entre elles. On peut encore dire qu'en tout point d'une surface $S = C^t$ et à tout instant, la longueur du gradient est la même constante, ou encore que l'extrémité du vecteur équipollent à $\vec{P}$ et mené par l'origine est située sur la sphère de rayon $\frac{h}{2\pi} \sqrt{\mathfrak{D}\mathfrak{C}}$, de sorte que l'indicatrice des quantités de mouvement est tracée sur la sphère de rayon $\frac{h}{2\pi} \sqrt{\mathfrak{D}\mathfrak{C}}$, de même que la trajectoire est sur la sphère de rayon $\sqrt{\mathfrak{D}\mathfrak{C}}$.

2. Equation des ondes Ω . — Pour passer de la mécanique ponctuelle de l'espace (ψ) à la mécanique ondulatoire de cet espace, nous suivrons le guide formel habituel.

Comme les Y_r ou Y_r dans le second choix de variables, peuvent être considérées comme des coordonnées cartésiennes rectangulaires, on aura, suivant le choix des variables :

1° à Y_r correspondra $Y_r = Y_{r^*}$, à $P_{r^*} = -\frac{h}{2\pi i} Y_{r^*}$ correspondra $P_r = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Y_r}$;

2° à Y_r^* correspondra $Y_r = Y_{r^*}$, à $P_{r^*} = -\frac{h}{2\pi i} Y_r$ correspondra $P_{r^*} = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial Y_r^*}$ l'équation d'ondes de ce mouvement quantifié sera :

$$\mathbf{F}\Omega = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Omega}{\partial t} \quad (1)$$

l'opérateur $\mathbf{F}$ étant, avec le premier choix de variables :

$$\mathbf{F} = \frac{2\pi i}{h} \sum_{rs} K_{rs} \mathbf{Y}_s \mathbf{P}_r \quad (2)$$

et avec le second choix :

$$\mathbf{F}_* = -\frac{2\pi i}{h} \sum_{rs} K_{rs} \mathbf{P}_{s^*} \mathbf{Y}_{s^*} \quad (2^*)$$

Il faut remarquer que l'ordre des facteurs $\mathbf{Y}$ et $\mathbf{P}$ dans $\mathbf{F}$ n'importe pas, car d'abord :

$$\mathbf{Y}_r \mathbf{P}_l = \mathbf{P}_l \mathbf{Y}_r \quad \text{si} \quad r \neq l$$

et si $\mathbf{Y}_r \mathbf{P}_r$ est remplacé par $\mathbf{P}_r \mathbf{Y}_r$ ou par $\frac{1}{2}(\mathbf{Y}_r \mathbf{P}_r + \mathbf{P}_r \mathbf{Y}_r)$, on doit ajouter au second terme de l'équation un terme $k\Omega$, k étant égal au nombre de fois qu'on a permuté un $\mathbf{P}_r$ avec un $\mathbf{Y}_r$: lorsqu'on intègre, cela revient à multiplier Ω par $e^{\frac{2\pi i}{h} kt}$, facteur de module unité.

Ecrivons l'équation d'ondes conjuguée, on a :

$$-\frac{2\pi i}{h} \sum_{sr} K_{rs}^* \mathbf{Y}_{s^*} \mathbf{P}_{r^*} \Omega^* = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Omega^*}{\partial t}.$$

Cette équation est justement celle obtenue en prenant le second choix de variables. En effet :

$$\mathbf{Y}_s^* = \mathbf{Y}_{s^*} \quad \mathbf{P}_s^* = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Y}_s^*} = -\mathbf{P}_{s^*}$$

et, en vertu de l'hermiticité :

$$K_{rl}^* = K_{lr}$$

d'où :

$$\mathbf{F}^* = -\frac{2\pi i}{h} \sum_{sr} K_{rs}^* \mathbf{Y}_s^* \mathbf{P}_r^* = \frac{2\pi i}{h} \sum_{sr} K_{sr} \mathbf{Y}_r \mathbf{P}_{s^*} = -\mathbf{F}.$$

et on a bien pour équation conjuguée de (1) :

$$\mathbf{F} \cdot \Omega^* = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Omega^*}{\partial t}. \quad (1^*)$$

Il est donc sans importance de prendre le premier ou le second choix de variables, d'appeler coordonnées $\mathbf{Y}_r$ ou $\mathbf{Y}_r^*$, les équations sont univoques.

Fock ⁽¹⁶⁾ a résolu l'équation (1) et a obtenu Ω de la forme suivante : en se reportant au Chapitre IV, à la démonstra-

tion du premier théorème de Dirac-Fock, on remarque que si l'on prend pour fonctions de base le système des $\psi_s(t)$, les K_{rl} sont nuls, les variables se confondent avec les constantes G_s , et on a une fonction Ω_0 telle que :

$$\frac{\partial \Omega_0}{\partial t} = 0.$$

Dans ce cas, Ω_0 ne dépend pas du temps :

$$\Omega_0 = \Omega_0(G_1, G_2, \dots, G_s, \dots).$$

Mais, comme :

$$y_r(t) = \sum_s G_s Y_{rs}(t)$$

on en déduit, en vertu de l'unitarité de la matrice Y que :

$$G_s = \sum_r Y_{rs}^*(t) Y_r.$$

Si l'on porte ces valeurs de G_s dans Ω_0 , on obtient la fonction Ω sous forme de fonction composée :

$$\Omega(Y_1, \dots, Y_s, \dots; t) = \Omega_0\left(\sum_r Y_{r1}^*(t) Y_r, \dots, \sum_r Y_{rs}^*(t) Y_r, \dots\right).$$

Cette fois, on peut contrôler la validité de l'équation des ondes Ω par le critère de Louis de Broglie : lorsque l'optique géométrique sera valable, il y aura des solutions de la forme :

$$\Omega = a e^{\frac{2\pi i}{h} \varphi}$$

où a sera une constante ; d'autre part, on devra avoir :

$$\mathbf{P}_r \Omega \sim \mathbf{P}_r \Omega.$$

On constate alors, en portant l'expression ci-dessus de Ω dans l'équation d'ondes que, si $\frac{\partial a}{\partial Y_i}$ est négligeable devant $\frac{\partial \varphi}{\partial Y_i}$, l'approximation de l'optique géométrique est valable,

et que la condition ci-dessus pour les opérateurs moments est bien vérifiée comme en mécanique ondulatoire simple. Mais on constate en plus qu'on peut toujours avoir rigoureusement pour solution une fonction Ω de la forme ci-dessus, a étant rigoureusement constant. Car on trouve que a doit satisfaire à l'équation d'ondes qui admet pour intégrale particulière $a = C^{te}$ et que, d'autre part, φ satisfait aussi à l'équation d'ondes. En rapprochant cette dernière équation de l'équation de Jacobi, on voit qu'elles sont identiques et que $\varphi = S$. Mais on voit aussi que Ω est une solution de l'équation de Jacobi. Donc, à l'encontre de la mécanique ondulatoire simple, la mécanique ondulatoire et la mécanique ponctuelle de l'espace (ψ) dérivent toutes deux d'une même équation ; en particulier la notion de trajectoire garde son sens dans cette mécanique ondulatoire. D'autre part, comme S et S^* jouent le même rôle, les surfaces d'ondes seront au choix $S = C^{te}$ ou $S^* = C^{te}$.

Les opérateurs $\mathbf{F}$ et $\vec{\mathbf{P}}$ jouent le rôle respectivement d'opérateurs hamiltonien et quantité de mouvement, de même que $\vec{\mathbf{OM}}$ joue le rôle d'opérateur coordonnée. La raison de la réussite de la théorie de la superquantification réside en l'identité de l'équation d'ondes et de l'équation de Jacobi.

3. Sens physique des ondes Ω . — Pour attribuer un sens physique aux ondes Ω , on ne peut songer à généraliser le principe des interférences, les Y_i n'ayant pas de sens physique. On doit le rechercher dans un rapprochement avec les ondes Ψ . Fock ⁽¹⁶⁾ a démontré dans le cas de systèmes obéissant à la statistique de Bose-Einstein, un théorème qu'on peut énoncer ainsi :

Si la fonctionnelle Ω est développable en série de la forme :

$$\Omega = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}^{*}(n_1, n_2, \dots, n_s, \dots; t) \frac{Y_1^{n_1} \cdot Y_2^{n_2} \dots Y_s^{n_s} \dots}{\sqrt{n_1!} \sqrt{n_2!} \dots \sqrt{n_s!} \dots} \quad (3)$$

les coefficients Ψ_{α}^* sont les valeurs de la fonction $\Psi^*(N, t)$ pour le point $N = N_{\alpha}$.

En effet, si l'on porte le développement de Ω dans l'équation d'ondes, on a :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}\Omega &\equiv - \sum_{rs} K_{rs} \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}^* (n_1, \dots, n_r, \dots, n_s, \dots; t) n_r \frac{Y_1^{n_1} \dots Y_r^{n_r-1} \dots Y_s^{n_s+1} \dots}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_r!} \dots \sqrt{n!} \dots} \\ &= \frac{h}{2\pi i} \sum_{\alpha} \frac{\partial \Psi_{\alpha}^*}{\partial t} \frac{Y_1^{n_1} \dots Y_r^{n_r} \dots Y_s^{n_s} \dots}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_r!} \dots \sqrt{n_s!} \dots} \end{aligned}$$

Cette expression montre, en égalant dans les deux membres le terme de même puissance par rapport aux $Y_1, \dots, Y_r, \dots, Y_s, \dots$, que les coefficients Ψ_{α}^* sont liés par :

$$\sum_{rs} K_{rs} \sqrt{(n_r + 1)n_s} \binom{n_r + 1}{n_r} \binom{n_s - 1}{n_s} \Psi_{\alpha}^* = - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi_{\alpha}^*}{\partial t}$$

ce qui est, en vertu de l'hermiticité de la matrice K_{rs} , la conjuguée de l'équation des ondes Ψ .

Cherchons à étendre ce théorème au cas de systèmes obéissant à la statistique de Fermi-Dirac. Pour y parvenir, il suffit que l'équation en Ψ^* obtenue soit l'équation des ondes Ψ^* , c'est-à-dire que le premier membre soit $\mathbf{F}_3 \Psi$. Il nous faut donc modifier l'hamiltonien $\mathbf{F}$ pour introduire la fonction de Wigner. Nous retrouvons $\mathbf{F}_3$ en écrivant :

$$\mathbf{F}_3 = \sum_{rs} K_{rs} \nu_r (n_r + 1) \sqrt{(n_r + 1)n_s} \binom{n_r + 1}{n_r} \binom{n_s - 1}{n_s} \nu_s (n_s)$$

$\nu_r(n_r)$ étant défini par :

$$\nu_r(n_r) = \begin{cases} 1 & \text{statistique de Bose-Einstein} \\ \left\{ \begin{array}{l} \nu_r, \text{ si } n_r = 0, 1 \\ 0 \text{ si } n_r \neq 0, 1 \end{array} \right\} & \text{statistique de Fermi-Dirac} \end{cases}$$

et ν_r étant la fonction de Wigner.

Ceci nous conduit à adopter pour hamiltonien valable dans les deux cas :

$$\mathbf{F}_{3*} = \frac{2\pi i}{h} \sum_{rs} K_{rs} \nu_r \mathbf{Y}_s \mathbf{P}_r \nu_s.$$

Enfin, de la même façon, à l'hamiltonien $\mathbf{F}_4$ de la mécanique (n) on fait correspondre ici un hamiltonien. On trouve alors :

$$\mathbf{F}_4 = \mathbf{F}_{3*} + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} G_{pq,rs} \nu_r \mathbf{P}_r \nu_q \mathbf{P}_q \mathbf{Y}_r \nu_r \mathbf{Y}_s \nu_s. \quad (4)$$

Le développement de Ω suivant la série (3) va nous amener à considérer Ψ_α^* comme le coefficient du α^e terme du développement de Ω en série de fonctions propres, et nous suggérer l'idée d'un principe de décomposition spectrale.

En effet, si nous posons :

$$\mathbf{n}_s = - \frac{2\pi i}{h} \mathbf{Y}_s \mathbf{P}_s = \mathbf{Y}_s \frac{\partial}{\partial \mathbf{Y}_s}$$

on a :

$$\mathbf{n}_s \mathbf{Y}_s^n = n \mathbf{Y}_s^n.$$

On peut donc dire que $\mathbf{Y}_s^n$ est une fonction propre de l'opérateur $\mathbf{n}_s$.

Pour que $\mathbf{Y}_s^n$ soit uniforme, $\mathbf{Y}_s$ étant complexe il faut que n soit entier; de plus n doit être positif ou nul pour être une fonction entière. Ces conditions introduisent d'une façon naturelle les valeurs propres entières $n = 0, 1, 2, \dots$

En outre, comme Y_s^n est une fonction propre définie à une constante multiplicative près, on peut poser que la fonction propre normée est $\frac{Y_s^n}{\sqrt{n!}}$, c'est-à-dire que par définition :

$$\left\| \frac{Y_s^n}{\sqrt{n!}} \right\| = 1.$$

Ainsi, le coefficient $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ s'introduit de façon naturelle comme un coefficient de normalisation dépendant du rang de la fonction propre.

Considérons l'opérateur $\mathfrak{N}_1 = \prod_{i=1}^{\infty} n_i$. Il a pour valeurs propres et pour fonctions propres le produit des valeurs propres et des fonctions propres des opérateurs n_i . Ses fonctions propres forment un ensemble dénombrable si on lui impose la condition supplémentaire que le degré de chacune soit fini, c'est-à-dire que, si pour l'une d'elles n_s est l'exposant de la variable Y_s la série $\sum n_s$ soit convergente, car on peut alors associer biunivoquement un point de l'ensemble $\mathcal{E}_+$ de points de l'espace (n) à une fonction propre : au point N_α de coordonnées $n_1, n_2, \dots, n_s, \dots$ correspondra la fonction propre ω_α :

$$\omega_\alpha = \frac{Y_1^{n_1} Y_2^{n_2} \dots Y_s^{n_s} \dots}{\sqrt{n_1!} \sqrt{n_2!} \dots \sqrt{n_s!} \dots}.$$

On voit alors que :

$$\Omega = \sum_{\beta} \Psi_{\beta}^* \omega_{\beta} \quad (3')$$

ω_{β} étant l'une des fonctions propres correspondant à un point N_{β} de $\mathcal{E}_s$ ou de $\mathcal{E}_{s_1}$ suivant la statistique, et Ψ_{β}^* la valeur de $\Psi^*(N, t)$ en ce point.

Le développement (3) de Ω n'est donc pas autre chose que le développement de Ω en série de fonctions propres de l'opérateur $\mathfrak{N}_1$. Nous appellerons $\mathfrak{N}_1$ « opérateur répartition ». Il indique le nombre de systèmes dans les divers états : n_1 dans l'état 1, n_2 dans l'état 2, ..., n_s dans l'état s , ...

Ce développement montre qu'il est possible d'étendre la théorie à un nombre $\mathfrak{N}$ de systèmes de l'assemblée non fixé ⁽²⁹⁾ : si $\mathfrak{N}$ est donné, les seuls termes ω_α qui figurent dans le développement sont ceux tels que $\sum_s n_s = \mathfrak{N}$; si au contraire, le nombre $\mathfrak{N}$ n'est pas fixé, on devra prendre tous les termes ω_α qui correspondent à un nombre total de systèmes $\mathfrak{N}_1, \mathfrak{N}_2, \dots, \mathfrak{N}_k, \dots$ que l'on puisse accepter. Les ensembles des répartitions où le nombre total de systèmes est $\mathfrak{N}_1, \mathfrak{N}_2, \dots, \mathfrak{N}_k, \dots$ sont évidemment des ensembles disjoints. La possibilité d'étendre ainsi la théorie à un nombre total de systèmes indéterminé est une généralisation importante et qui pourra être utilisée principalement dans le cas de l'étude d'un ensemble de photons.

De ce qui précède, il ressort que nous ne devons accepter comme solution de l'équation d'ondes (1) possédant un sens physique, que des fonctionnelles Ω développables en série des ω_α .

C'est cette restriction sur les solutions de l'équation d'ondes qui constitue le principe fondamental de la superquantification. D'autre part, le développement de la fonction Ω à l'instant initial ne devra comprendre que des termes ω_α acceptables, c'est-à-dire d'une part correspondant à la statistique imposée, d'autre part tels qu'ils correspondent à un nombre de systèmes $\mathfrak{N}$ donné ou éventuellement possible.

4. Espace (Ω). — Nous pouvons considérer les fonctionnelles Ω comme des éléments d'un espace fonctionnel, ainsi que

nous l'avons fait pour toutes les mécaniques ondulatoires que nous avons rencontrées jusqu'à présent. Les fonctionnelles Ω ont pour propriétés d'être, outre des solutions de l'équation d'ondes, des polynômes de degré fini d'un nombre infini de variables : $Y_1, Y_2, \dots Y_s \dots$ (la somme des exposants des Y_s devant être égale à $\mathfrak{N}_k$ nombre total éventuel de systèmes), tels que la somme des carrés des modules des coefficients du développement en série des ω_α soit égale à l'unité : $\sum \Psi_\alpha \Psi_\alpha^* = 1$, les fonctions ω_α qui sont des monomes des divers degrés qu'on peut former avec les Y_s constituant un système de base complet pour les fonctionnelles Ω .

Nous dirons que deux fonctionnelles Ω sont infiniment voisines si elles correspondent à des probabilités de répartition infiniment voisines, c'est-à-dire à des états infiniment voisins de l'assemblée des systèmes. D'après le sens physique attribué aux $\Psi_\alpha \Psi_\alpha^*$ nous sommes amené à définir le voisinage des fonctionnelles Ω par le voisinage de leurs coefficients dans le développement en série de ω_α . On peut l'exprimer par l'intermédiaire d'une distance en posant :

$$\text{distance } \{ \Omega, \Omega' \} = \sqrt{\sum_{\alpha} (\Psi_{\alpha} - \Psi'_{\alpha})(\Psi_{\alpha}^* - \Psi'^*_{\alpha})}.$$

L'application d'un des opérateurs rencontrés : $\mathbf{Y}_s, \mathbf{P}_s, \mathbf{n}_s, \mathbf{u}_1$ à une fonctionnelle Ω donne un polynôme de degré fini des variables $Y_1, \dots Y_s \dots$, mais la somme des carrés des modules des coefficients du développement en série des ω_α est convergente sans être égale à l'unité en général.

Comme nous n'avons à considérer que des fonctionnelles Ω et celles obtenues en leur appliquant de tels opérateurs, nous prendrons pour espace fonctionnel attaché à la mécanique ondulatoire (Ψ) l'espace des polynômes de degré fini d'un nombre infini de variables $Y_1 \dots Y_s, \dots$, tels que la somme des carrés des modules des coefficients du développement en

série des monomes ω_α soit convergente. Nous désignerons cet espace par (Ω) .

Nous appellerons coordonnées d'un tel polynôme P dans le système des ω_α les coefficients Φ_α du développement en série de ω_α :

$$P = \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha} \omega_{\alpha}.$$

Nous définirons dans l'espace (Ω) :

1° L'élément $P_1 + P_2$ comme la somme des polynômes P_1 et P_2 ;

2° l'élément $a.P$, a étant un nombre réel ou complexe, comme le polynôme obtenu en multipliant P par a ;

3° l'élément zéro, comme le polynôme identiquement nul ;

4° le produit scalaire $(P_1.P_2)$ de P_1 et P_2 par l'expression :

$$(P_1.P_2) = \sum \Phi_{1\alpha}^* \cdot \Phi_{2\alpha},$$

$\Phi_{1\alpha}$ et $\Phi_{2\alpha}$ étant respectivement les coordonnées de P_1 et P_2 dans le système des ω_α .

On vérifie alors aisément que cet espace est un espace de Hilbert, et est applicable sur l'espace $(\mathfrak{H}_0)$, les ω_α jouant le rôle de système de base.

Les fonctionnelles Ω solutions de l'équation d'ondes sont toujours situées sur la sphère de rayon unité.

Les opérateurs de la mécanique ondulatoire (ψ) peuvent être considérés comme des transformations dans l'espace (Ω) . Examinons leurs propriétés. D'abord, *ils ont pour domaine tout l'espace* (Ω) . En effet, les opérateurs Y_s et P_s peuvent opérer sur tout polynôme, et les autres opérateurs ne sont que des produits ou sommes de ceux-ci. De plus, nous avons vu que :

Leur spectre est discontinu, et les fonctions propres forment un système complet pour les éléments de (Ω) fonction seulement des variables intéressant l'opérateur considéré.

Examinons maintenant l'hermiticité de ces opérateurs.

$$(\Omega_1 \cdot \mathbf{Y}_s \Omega_2) = \sum \sqrt{n_{s\alpha} + 1} \Psi_{1\beta} \cdot \Psi_{2\alpha}^*$$

$$(\Omega_1 \cdot \mathbf{P}_s \Omega_2) = \sum -\frac{\hbar}{2\pi i} \sqrt{n_{s\alpha} + 1} \Psi_{1\alpha} \cdot \Psi_{2\beta}^*$$

β étant le terme différant de α par la valeur de $n_{s\beta}$ supérieure d'une unité à $n_{s\alpha}$. Ces deux égalités montrent que les $\mathbf{Y}_s$ et $\mathbf{P}_s$ ne sont pas hermitiques, mais qu'on a :

$$\mathbf{Y}_s^+ = \frac{2\pi i}{\hbar} \mathbf{P}_s \quad \mathbf{P}_s^+ = -\frac{\hbar}{2\pi i} \mathbf{Y}_s.$$

Au contraire, les $\mathbf{n}_s$, $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{F}$ le sont. En effet :

$$(\Omega_1 \cdot \mathbf{n}_r \Omega_2) = \sum n_r \Psi_{1\alpha} \Psi_{2\alpha}^* = (\mathbf{n}_r \Omega_1 \cdot \Omega_2)$$

et $\mathbf{n}_1$, qui est le produit des $\mathbf{n}_r$ qui sont hermitiques et commutables entre eux est hermitique.

D'autre part, $\mathbf{F}$ est hermitique du fait que $\|\Omega\|$ est constant.

Ainsi encore, dans le cas de la mécanique (ψ) , les opérateurs correspondant à une grandeur physique (ici répartitions) sont hermitiques.

5. Concepts et Postulats de la Superquantification exprimés à l'aide de la Mécanique Ondulatoire (ψ) . — La mécanique ondulatoire (ψ) comme celle de l'espace (n) , outre qu'elle forme du point de vue abstrait un ensemble logique indépendant, possède un sens physique qui lui est donné par la théorie de la Superquantification. Sous cette seconde manière d'envisager cette théorie, la mécanique (ψ) en constitue le cadre formel. Comme avec la mécanique (n) , nous diviserons les postulats en deux groupes, le second dépendant seul de la mécanique (ψ) .

Groupe I. — 1^o Concept « système mécanique ».

2° Concept « grandeur mécanique attachée à un système ».

3° *Postulat 1* ou *Premier principe de quantification*. — A toute grandeur mécanique correspond un opérateur linéaire hermitique de l'espace (ψ) (espace (ψ_1) , (ψ_2) ou (ψ_4) suivant le cas considéré), possédant un spectre tel que les différentielles propres généralisées forment un système de base complet pour les éléments de l'espace (ψ) fonction seulement des variables intéressant l'opérateur considéré.

4° *Postulat 2* ou *Second principe de quantification*. — Les seules valeurs que puisse prendre une grandeur mécanique sont les valeurs propres de l'opérateur correspondant

5° *Définition*. — Lorsqu'une grandeur A attachée à un système mécanique aura une valeur propre du n^e intervalle Δx_n , nous dirons que « le système est dans le n^e état par rapport à la grandeur A ».

Groupe II. — A. 1° *Postulat 1*. — A chaque assemblée de systèmes est attaché un point M de l'espace (ψ) correspondant.

B. 2° *Définition*. — On appelle « grandeur de répartition » attachée à une assemblée de systèmes mécaniques, toute grandeur caractérisant le nombre de systèmes dans certains états par rapport à une certaine grandeur.

3° *Postulat 2*. — A toute grandeur de répartition correspond un opérateur linéaire formé à partir des variables coordonnées du point figuratif de l'assemblée dans le système de base des fonctions propres et différentielles propres de la grandeur mécanique considérée.

4° *Définition*. — On appelle « valeur propre » d'un opérateur de répartition **B** un nombre β tel que :

$$\mathbf{B}\varphi_\beta = \beta\varphi_\beta$$

φ_β étant une fonction des variables coordonnées du point figuratif M et soumise aux conditions du postulat 3.

5° *Postulat 3 ou Premier principe de Superquantification.* — Les fonctions propres des opérateurs répartition doivent satisfaire aux conditions suivantes :

a) être uniformes,

b) être des éléments de l'espace (Ω) défini plus haut.

6° Ayant imposé ces conditions aux fonctions propres, les opérateurs de répartition peuvent être considérés comme des opérateurs de l'espace (Ω) . Nous admettrons alors :

Postulat 4. — Un opérateur de répartition **B** satisfait aux conditions suivantes :

a) c'est un opérateur linéaire de l'espace (Ω) ,

b) il est hermitique,

c) il possède un spectre tel que les fonctions propres forment un système de base complet pour les éléments de l'espace (Ω) fonction des variables intéressant l'opérateur **B**.

7° *Postulat 5. Deuxième principe de Superquantification ou Principe des Valeurs propres.* — A un instant t la valeur d'une grandeur de répartition est nécessairement une des valeurs propres à cet instant de l'opérateur correspondant.

C. 8° *Postulat 6.* — L'état d'une assemblée de systèmes est à chaque instant t représenté par une fonction du point M de l'espace (ψ) et du temps appartenant à l'espace (Ω) , normée, appelée « fonction d'ondes », solution de l'équation :

$$\mathbf{F}\Omega = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Omega}{\partial t}$$

F étant l'hamiltonien et h la constante de Planck.

D. 9° Soient Y_s les coordonnées du point M , $Y_i \dots Y_k$ celles qui intéressent l'opérateur **B** considéré, $\beta(t)$ ses valeurs propres, $\varphi_\beta(t)$ ses fonctions propres. Soit Ω_B la fonction obtenue de la façon suivante : considérant le développement de Ω et Ω_B dans le système de base des ω_α :

$$\Omega = \sum_x \Psi_x \omega_x \quad \Omega_B = \sum_\gamma \Psi_{B,\gamma} \omega_\gamma$$

$\Psi_{B, \gamma}$ s'obtient en ajoutant tous les Ψ_x qui correspondent à des fonctions de base ω_x contenant les variables intéressant **B** aux mêmes puissances et ne différant que par les puissances des autres variables, les ω_γ ne dépendant que des variables Y_s intéressant **B**.

Les fonctions propres formant un système complet pour les fonctions de l'espace (Ω) des variables intéressant **B**, on peut développer Ω_B sous la forme :

$$\Omega_B(Y_i \dots Y_k; t) = \sum_{\lambda} c_{\lambda}(t) \varphi_{\lambda}(Y_i \dots Y_k; t).$$

Nous admettrons alors le postulat suivant :

Postulat 7 ou Principe de décomposition spectrale. — La probabilité pour qu'une mesure faite à l'instant t fournisse pour la grandeur **B** la valeur $\beta(t)$ est $c_{\beta}(t)c_{\beta}^*(t)$.

10° *Définitions.* — Les définitions a , b , c , sont celles habituelles qui définissent les opérateurs coordonnées et les moments conjugués.

d) On appelle « opérateur n_j » :

$$n_j = -\frac{2\pi i}{h} Y_j P_j = Y_j \frac{\partial}{\partial Y_j}$$

e) On appelle opérateur de répartition $\mathfrak{N}_1$:

$$\mathfrak{N}_1 = \prod_{j=1}^{\infty} n_j$$

11° *Postulat 8.* — L'opérateur hamiltonien **F** de l'équation d'ondes est :

1° Dans le cas d'une assemblée de systèmes quelconques obéissant à la statistique de Bose-Einstein, l'opérateur **F** défini plus haut (éq. 2).

2° Dans le cas de systèmes formés d'une seule particule, qui peuvent être en interaction deux à deux ; et lorsqu'on se

borne à considérer comme grandeur mécanique l'énergie, l'opérateur $\mathbf{F}_{4*}$ défini plus haut (éq. 4).

12° *Postulat 9.* L'opérateur $\mathbf{n}_j$ correspond au « nombre de systèmes dans l'état j ».

Il s'ensuit que l'opérateur $\mathbf{n}_i$ est celui correspondant à la répartition des systèmes dans les divers états.

Les opérateurs répartition qui sont ceux possédant un sens physique sont des opérateurs hermitiques de la mécanique (ψ) formés à l'aide des $\mathbf{Y}_r$ et $\mathbf{P}_s$, tandis que ces derniers qui n'ont pas de signification physique ne sont pas hermitiques.

Dans ces deux groupes de concepts et postulats, nous pensons avoir énoncé les principes de la superquantification en utilisant la mécanique ondulatoire (ψ). Remarquons que nous n'avons pas précisé le nombre de systèmes de l'assemblée. Cette forme est donc plus générale que celle que nous avons adoptée à l'aide de la mécanique (n) où nous avons précisé leur nombre $\mathfrak{N}$, mais il est également possible, avec la mécanique (n), de parvenir à cette généralisation, les deux formes étant équivalentes, comme nous allons maintenant l'examiner de plus près.

6. Remarques générales sur la mécanique ondulatoire (ψ).

— La mécanique ondulatoire (ψ) semble une voie naturelle pour parvenir à la théorie de la superquantification. On a donc à étudier une mécanique ondulatoire dans laquelle l'espace de configuration est l'un des espaces $(\psi_1), (\psi_2), (\psi_4)$, c'est-à-dire un espace de Hilbert.

Cette méthode montre pourquoi la Superquantification réussit pour les systèmes quelconques obéissant à la statistique de Bose-Einstein et sans interaction entre eux. Ce succès est dû à l'identité de l'équation d'ondes et de l'équation de Jacobi de la mécanique ponctuelle de l'espace (ψ) qui est équivalente à la mécanique ondulatoire usuelle.

La superquantification revient à faire un choix sur les

mouvements possibles du point figuratif de l'espace (ψ) , et à fixer la probabilité pour qu'un mouvement de ce point soit réalisé. Mais nous ne pensons pas qu'on aurait songé à développer cette méthode si auparavant Dirac n'avait indiqué la voie par la considération de la mécanique (n) .

Enfin, nous pensons que cette méthode d'emploi de la mécanique abstraite (ψ) pourrait s'étendre au cas d'interactions entre les systèmes et au cas de la statistique de Fermi-Dirac, que nous n'avons pas justifié ici.

Nous allons chercher maintenant à rattacher les deux mécaniques ondulatoires (n) et (ψ) de diverses façons, pour bien mettre en valeur leur équivalence.

CHAPITRE VII

Mécanique ponctuelle dans les espaces (Ψ_N) et (Ω) . Mécaniques ondulatoires de deuxième type.

1. — Dans ce chapitre, nous allons chercher à rapprocher les deux méthodes qui nous ont servi pour parvenir à la superquantification : celle de l'espace (n) et celle de l'espace (ψ) . Pour faire ces rapprochements, nous étudierons la mécanique ponctuelle de l'espace (Ω) qui est équivalente à la mécanique ondulatoire de l'espace ψ , et la mécanique ponctuelle de l'espace (Ψ_N) qui est équivalente à la mécanique ondulatoire de l'espace (n) .

Ensuite nous comparerons ces deux mécaniques ponctuelles, puis nous serons amené à associer à un système d'équations canoniques une mécanique ondulatoire d'une manière nouvelle que nous appellerons « mécanique ondulatoire de deuxième type ».

2. **Mécanique ponctuelle (Ω) .** — La mécanique ondulatoire (Ψ) est équivalente à la mécanique ponctuelle de l'espace (Ω) , ce qui se démontre au moyen de deux théorèmes analogues à ceux de Dirac-Fock pour la mécanique usuelle, dont voici les énoncés :

Théorème 1. « Les coefficients Φ_α du développement :

1° Dans un système de base orthonormal complet $\{ \varphi_\alpha \}$ d'une fonction Ω solution de l'équation d'ondes ;

2° Dans le système des fonctions propres d'un opérateur

de répartition **B** de la fonction Ω_B définie au chapitre précédent, satisfont au système d'équations différentielles :

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{d\Phi_\alpha}{dt} = \sum_{\lambda} \mathcal{K}_{\alpha\lambda} \Phi_\lambda,$$

lorsque existe la matrice $\mathcal{K}_{\alpha\beta}$ définie par :

$$\mathcal{K}_{\alpha\beta} = \left(\varphi_\alpha \cdot \left[\mathbf{F} - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right] \varphi_\beta \right).$$

Théorème 2. — Si on considère comme une fonction hamiltonienne la fonctionnelle $\mathcal{F}$ définie par :

$$\mathcal{F} = \sum_{\alpha, \beta} \mathcal{K}_{\alpha\beta} \Phi_\beta \Phi_\alpha^*,$$

les quantités Φ_α et $\frac{h}{2\pi i} \Phi_\alpha^*$ sont canoniquement conjuguées :

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{d\Phi_\alpha}{dt} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \Phi_\alpha^*} ; \quad \frac{h}{2\pi i} \frac{d\Phi_\alpha^*}{dt} = - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \Phi_\alpha}.$$

1° Si les Φ_α sont les coordonnées, les moments conjugués sont :

$$\mathcal{P}_\alpha = \frac{h}{2\pi i} \Phi_\alpha^*.$$

2° Si les Φ_α^* sont les coordonnées, les moments conjugués sont :

$$\mathcal{P}_{\alpha^*} = - \frac{h}{2\pi i} \Phi_\alpha$$

et les deux choix de variables équivalentes.

On peut considérer que ces équations canoniques définissent le mouvement du point M de l'espace (Ω) défini par :

$$\overrightarrow{\text{OM}} = \Omega(\psi, t).$$

Il y a donc équivalence entre mécanique ponctuelle (Ω) et mécanique ondulatoire (Ψ).

Les démonstrations sont identiques à celles du chapitre IV, seule l'expression des produits scalaires diffère, mais on n'a pas à les expliciter dans la démonstration.

Si, en particulier, comme grandeur A de l'espace (Ω) nous prenons la répartition à l'instant initial, et comme grandeur B la répartition à un instant t , nous avons comme fonctions de base les ω_α fonctions propres de l'opérateur $\mathfrak{H}_1$, et les Φ_α se trouvent être les Ψ_α^* , d'où :

$$\Omega(M, t) = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}^*(t) \omega_{\alpha}.$$

Les ω_α ne dépendant pas du temps, on a simplement :

$$\mathcal{H}_{\alpha\beta} = (\omega_\alpha, \mathbf{F}\omega_\beta).$$

Les $\mathcal{H}_{\alpha\lambda}$ dépendent du temps parce que l'opérateur $\mathbf{F}$ en dépend. D'après le premier théorème :

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{d\Psi_{\alpha}^*}{dt} = \sum_{\lambda} \mathcal{H}_{\alpha\lambda} \Psi_{\lambda}^*. \quad (1)$$

Mais on sait que dans le système des ω_α les Ψ_{α}^* sont justement ceux qui figurent dans les équations linéaires différentielles qu'on obtient à partir de l'équation des ondes Ψ^* en fixant le point N de $\Psi^*(N, t)$ en N_α . Il faut donc bien vérifier que ces équations sont identiques.

Bornons-nous au cas où il n'y a pas d'interactions entre les systèmes. On a :

$$\mathbf{F}\omega_{\lambda} = \sum_{rs} -K_{rs} \mathfrak{Y}_r \mathfrak{Y}_s \frac{\partial}{\partial \mathfrak{Y}_r} \mathfrak{Y}_s \omega_{\lambda}.$$

De l'expression de ω_λ on tire :

$$\mathbf{F}\omega_\lambda = \sum_{rs} -K_{rs} \nu_r \sqrt{(n_r + 1)n_s} \nu_s \frac{Y_1^{n_1} \dots Y_r^{n_r + 1} \dots Y_s^{n_s - 1} \dots}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{(n_r + 1)!} \dots \sqrt{(n_s - 1)!} \dots}$$

Il s'ensuit que $\mathcal{K}_{\alpha\beta}$ est nul sauf si ω_α et ω_β sont deux fonctions propres telles que tous les coefficients soient égaux sauf deux qui diffèrent, l'un de $+1$, l'autre de -1 , et de plus tels que ν_r ou ν_s ne soit pas nul. Le système d'équations (1) se trouve alors être justement celui déduit de l'équation des ondes Ψ^* .

Voilà qui montre que la mécanique ponctuelle de l'espace (Ω) est équivalente à la mécanique ondulatoire de l'espace (n). Ce point nous permet d'envisager d'une nouvelle manière la liaison qui existe entre les fonctions Ω et les fonctions de l'espace (n). En effet, si nous posons :

$$\Psi^*(N, t) = \begin{cases} \Psi^*(N_x, t) & \text{si } N = N_x, \quad x = 1, 2, \dots \\ 0, & \text{si } N \text{ n'est pas un des points } N_x \text{ de } \mathcal{E}_+, \end{cases}$$

les points N_x sont précisément les points de l'ensemble $\mathcal{E}_+$ de l'espace (n), et la fonction $\Psi(N, t)$ est justement une solution de l'équation des ondes Ψ , car, comme nous venons de le montrer, les équations (1) ne font que traduire l'équation des ondes $\Psi^*(N, t)$. Ainsi donc, on peut obtenir l'équation d'ondes $\Psi(N, t)$ de deux manières :

1° en effectuant une transformation de contact qui fait passer de la mécanique de l'espace (ψ) à la mécanique de l'espace (n) ;

2° en considérant la mécanique ponctuelle de l'espace (Ω) qui est équivalente à la mécanique ondulatoire (ψ), et en définissant une certaine fonction $\Psi(N, t)$ comme nous venons de le faire. C'est cette seconde manière que nous allons préciser.

3. Mécanique ponctuelle (Ψ_N). — De même que dans le cas des ondes Ω , si l'on développe Ψ dans un certain système de base, la démonstration des théorèmes de Dirac-Fock est encore valable en donnant au produit scalaire la signification qu'il a dans l'espace (Ψ_N). Nous voyons donc que la mécanique ondulatoire de l'espace (n) est équivalente à une mécanique ponctuelle de l'espace (Ψ_N). En particulier, si on développe Ψ dans le système de base des Ψ_α les coefficients Ψ_α sont les conjugués de ceux obtenus lorsqu'on développe la fonction Ω dans le système de base des fonctions propres ω_α de la grandeur répartition. Ainsi les équations canoniques obtenues pour les Ψ_α peuvent être considérées comme décrivant aussi bien le mouvement d'un point de l'espace (Ω) quand on le rapporte au système de base des ω_α , que le mouvement d'un point de l'espace (Ψ_N) quand on le rapporte au système de base des Ψ_α . Connaissant les équations liant les Ψ_α , si l'on définit une fonction

$$\Psi^{(1)}(N, t) = \begin{cases} \Psi_\alpha(t) & \text{si } N = N_\alpha, N_\alpha \text{ étant le } \alpha^{\text{e}} \text{ point de } \mathcal{E}_+ \\ 0 & \text{si } N \text{ n'appartient pas à } \mathcal{E}_+ \end{cases}$$

la fonction $\Psi^{(1)}$ ainsi définie se trouve être identique à la fonction d'ondes $\Psi(N, t)$.

Ceci nous montre qu'il y a applicabilité du mouvement d'un point de l'espace (Ω) sur le mouvement d'un point de l'espace (Ψ_N). On voit donc comment ces deux mécaniques se rejoignent.

En donnant des sens physiques convenables à la mécanique ondulatoire de l'espace (ψ), à la mécanique ondulatoire de l'espace (n), à la mécanique ponctuelle de l'espace (Ω), à la mécanique ponctuelle de l'espace (Ψ_N), on trouve des résultats physiques identiques.

Nous avons montré comment s'effectuait le passage d'une mécanique à l'autre. Mais il reste un lien logique à établir

en ce qui concerne le passage de la mécanique ponctuelle (n) à la mécanique ondulatoire (n), qui ne satisfait pas au critère de Louis de Broglie (contrôle par l'approximation de l'optique géométrique). On pourrait, partant de la mécanique ponctuelle (Ω) à laquelle nous sommes arrivé, passer à la mécanique ponctuelle (Ψ_N), pour ensuite remonter à la mécanique ondulatoire (n). Mais il est plus logique de les relier sans faire appel à l'intermédiaire de la mécanique (Ψ_N) qui ne se trouve définie que parce que la mécanique ondulatoire (n) existe. Ce lien entre mécanique ponctuelle (Ω) et mécanique ondulatoire (n) nous semble pouvoir être réalisé en faisant intervenir ce que nous désignerons sous le nom de « mécaniques ondulatoires de deuxième type ».

4. Mécaniques ondulatoires de deuxième type. — A des variables $x_r(t)$, $p_r(t)$ satisfaisant à des équations canoniques

$$\frac{dx_r}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_r} \quad \frac{dp_r}{dt} = - \frac{\partial H}{\partial x_r}$$

associons une fonction $\Xi(r, t)$ égale à $x_r(t)$ pour r correspondant au r^{e} indice, nulle pour toutes les autres valeurs de r , — les x_r formant un ensemble fini ou un ensemble infini dénombrable, — et définissons un opérateur H tel que :

$$\frac{2\pi i}{h} H \Xi(r, t) = \frac{\partial H}{\partial p_r}.$$

Nous pouvons considérer la fonction $\Xi(r, t)$ comme définissant le mouvement d'un point dans un espace à une dimension et dont l'équation d'ondes sera :

$$H \Xi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Xi}{\partial t}.$$

On peut définir une correspondance biunivoque entre l'ensemble E_r des points de l'espace (r) où Ξ n'est pas nul, et un ensemble $\mathcal{E}_r$ des points d'un autre espace.

En particulier, si comme système d'équations canoniques nous prenons celles définissant le mouvement d'un point dans un espace de fonctions d'ondes quelconques que nous désignerons par (Ψ) , on a un ensemble dénombrable de variables x_r , et :

$$\frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{2\pi i}{h} \sum_s \mathcal{K}_{rs} x_s.$$

Nous trouvons de suite un opérateur H , à savoir :

$$H = \sum_s \mathcal{K}_{rs} (s \mid r).$$

Au lieu de l'espace (r) à une dimension, nous pouvons envisager un espace (a) à un nombre quelconque de dimensions, en définissant la correspondance biunivoque entre E_r et $\mathcal{E}_r$ en disant que le point A_r de coordonnées entières positives ou nulles $a_{r,1}, a_{r,2}, \dots, a_{r,n}, \dots$ correspond au point d'abscisse r de l'espace (r) . Désignant par H_1 et Ξ_1 le nouvel opérateur et la nouvelle fonction d'ondes, nous devons avoir :

$$H_1 \Xi_1(A_r, t) = H \Xi(r, t); \quad \Xi_1(A_r, t) = \Xi(r, t).$$

D'où :

$$H_1 = \sum_s \mathcal{K}_{rs} (a_{s,1} \mid a_{r,1}) (a_{s,2} \mid a_{r,2}) \dots (a_{s,n} \mid a_{r,n}) \dots$$

et l'équation des ondes $\Xi_1(A_r, t)$ peut s'écrire en explicitant :

$$\sum_{\lambda} \mathcal{K}_{\alpha\lambda} \Xi_1(A_{\lambda}, t) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Xi_1(A_{\alpha}, t)}{\partial t}.$$

Les opérateurs H et H_1 peuvent toujours être considérés comme dérivant de la fonction hamiltonienne d'un mouvement ponctuel des espaces (r) et (a) à la manière des mécani-

ques ondulatoires du premier type, car les opérateurs $(a_i + b \mid a_i)$ peuvent être regardés comme des prolongements

des opérateurs $e^{b \frac{\partial}{\partial a_i}}$ qui sont construits à partir de

$e^{\frac{2\pi i b}{h} p_i}$, p_i étant l'opérateur moment conjugué de la coordonnée a_i . D'autre part, les coordonnées a_i peuvent figurer dans les $\mathcal{K}_{\alpha\lambda}$. Donc, de H ou de H_1 on peut remonter à une mécanique ponctuelle d'où ce théorème :

« Toute mécanique ondulatoire de second type associée à une mécanique ponctuelle d'un espace de fonctions d'ondes peut être considérée comme une mécanique ondulatoire de premier type. »

Réciproquement : « Toute mécanique ondulatoire de premier type telle que les fonctions d'ondes ne soient différentes de zéro qu'en un ensemble dénombrable de points, peut être considérée comme une mécanique de deuxième type associée à la mécanique ponctuelle d'un espace de fonction d'ondes ».

En effet, toute fonction d'ondes Ψ d'une telle mécanique est développable en série des fonctions Ψ_α , les Ψ_α étant des fonctions égales à l'unité au α^o point de l'ensemble $\mathcal{S}$ où Ψ peut être non nul, égale à zéro en tous les autres points.

Dans l'espace des fonctions Ψ les Ψ_α forment un système de base complet, et on a :

$$\Psi = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha} \Psi_{\alpha}$$

Ψ_{α} étant la valeur de Ψ au α^o point de $\mathcal{S}$.

D'après les théorèmes généralisant ceux de Dirac-Fock, le mouvement du point M défini par :

$$\overrightarrow{OM} = \Psi$$

est régi par des équations canoniques dans lesquelles les Ψ_α jouent le rôle de coordonnées. Si on associe à ces équations une mécanique du second type, on retombe sur la mécanique ondulatoire dont on était parti, ce qui démontre le théorème, puisqu'il existe au moins un mouvement ponctuel auquel elle soit associée de la deuxième manière.

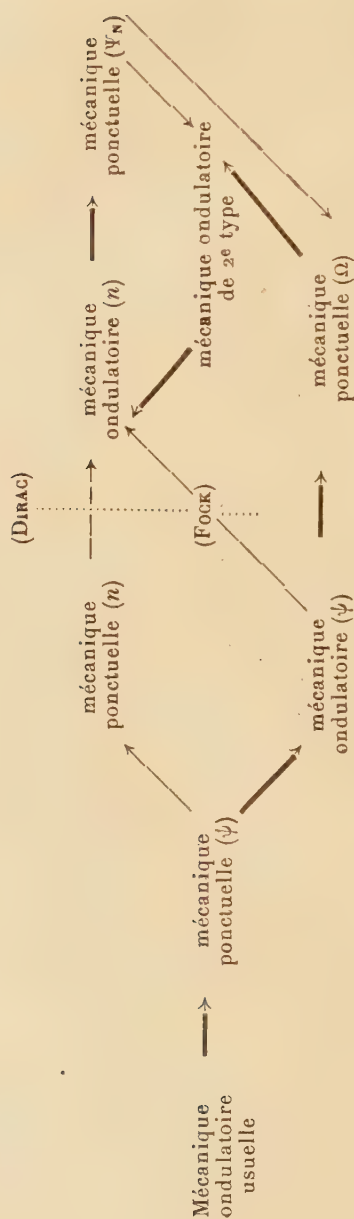
De plus, si l'on part d'une mécanique ondulatoire de deuxième type on voit, en vertu de la démonstration précédente, qu'il y a applicabilité entre les deux mouvements ponctuels : celui dont on est parti et celui de l'espace des fonctions d'ondes de la mécanique de deuxième type.

En particulier si nous partons de la mécanique ponctuelle de l'espace (Ω) où :

$$\mathcal{H}_{\alpha\beta} = (\omega_\alpha \cdot \mathbf{F} \omega_\beta)$$

les ω_α étant définis par les exposants n_s des variables Y_s qui y figurent, il est naturel de prendre comme espace (a) l'espace (n) puisque à toute fonction ω_α correspond biunivoquement un point de l'ensemble $\mathcal{E}_+$ de cet espace. Mais, comme nous l'avons vu, les seuls $\mathcal{H}_{\alpha\beta}$ non nuls sont tels que l'équation obtenue est identique à celle de la mécanique ondulatoire (n) . Cette identité résulte d'une part de la forme de $\mathbf{F}$, d'autre part de la forme des ω_α , c'est-à-dire des propriétés de la mécanique ondulatoire (ψ) . Pour tout autre hamiltonien $\mathbf{F}$ les deux mécaniques seraient différentes, et on peut dire que ce n'est que par un hasard heureux que la mécanique ondulatoire de deuxième type associée à la mécanique ponctuelle (ψ) coïncide avec la mécanique ondulatoire (n) obtenue précédemment.

5. Vue d'ensemble sur la Superquantification. — Voilà, pensons-nous, développée logiquement la théorie de la Superquantification, en utilisant des mécaniques abstraites. On voit que la méthode s'appuyant sur la mécanique ondu-



SCHEMA DES RELATIONS ENTRE LES DIVERSES MÉCANIQUES UTILISÉES EN SUPERQUANTIFICATION.

toire de l'espace (ψ) est la voie logique et sûre pour y parvenir. Elle montre que la théorie est valable, grâce à l'identité de l'équation des ondes ψ et de l'équation de Jacobi. D'autre part, la superquantification réside, comme toute quantification, dans une restriction des mouvements possibles. Il est remarquable que le succès de la mécanique (n) soit dû à la forme de l'hamiltonien $\mathbf{F}$. Sans cette circonstance providentielle, Dirac aurait abouti à des conclusions fausses, tandis que sa méthode, habilement conçue, nous apparaît comme un chemin de traverse sautant les intermédiaires nécessaires à un bon développement logique, parmi lesquels nous avons attribué un rôle important aux mécaniques ondulatoires de second type.

Au point de vue des applications, il y a des cas où la superquantification est plus commode que la mécanique ondulatoire usuelle, d'autres où elle est la seule possible comme jusqu'à maintenant pour les problèmes où intervient le rayonnement.

Au cours du développement, nous avons eu à utiliser de nombreuses mécaniques, aussi jugeons-nous bon de montrer sur le schéma ci-contre la façon dont elles sont reliées entre elles, les flèches grasses indiquant la voie logique.

CHAPITRE VIII

Sur quelques autres théories quantiques.

Sans entrer dans les détails, nous tenons à signaler les tentatives qui ont été faites pour utiliser d'autres mécaniques ponctuelles ou ondulatoires dans d'autres théories quantiques. Il en a été ainsi dans la théorie quantique des champs, dans la théorie de la valence de Heitler, puis dans la nouvelle théorie des photons et de l'interaction de la lumière et de la matière que vient de proposer Louis de Broglie.

De notre côté, nous avons tenté le même effort en proposant une méthode pour l'étude des systèmes indéterminés que nous avons appelée *hyperquantification*, et que nous allons esquisser.

1. Méthode de l'hyperquantification. — Il résulte des pages précédentes que, pour décrire le mouvement ou « l'état » d'un corpuscule, d'un système de corpuscules ou d'une assemblée de systèmes, ce que nous désignerons par un « ensemble mécanique », on associait un « point figuratif » qui se déplace dans un certain espace ($\mathcal{C}$) en suivant les lois d'une mécanique ondulatoire de cet espace. Nous avons montré qu'il était équivalent d'associer un point M de l'espace ($\mathcal{V}$) des fonctions d'ondes de la mécanique ondulatoire ($\mathcal{C}$) dont le mouvement avait lieu suivant les lois d'une mécanique ponctuelle.

Connaissant exactement la fonction d'ondes initiale, (c'est-à-dire la position initiale du point M de l'espace ($\mathcal{C}$))

puisque l'on a $\overrightarrow{OM} = \Psi$, l'état de l'ensemble mécanique est à chaque instant déterminé.

Si, au contraire, nous ne connaissons pas exactement la fonction d'ondes initiale Ψ_0 , par suite d'une mesure soit incomplète soit imprécise, le mouvement du point M n'est pas déterminé. Mais si nous connaissons avec certaines probabilités les fonctions d'ondes initiales possibles, c'est-à-dire les positions initiales possibles du point M, nous pouvons à chaque instant, fixer avec une certaine probabilité l'état de l'ensemble mécanique considéré. Il suffit d'associer à chaque point M possible la probabilité correspondante.

Nous avons vu plus haut que la fonction hamiltonienne pour un mouvement d'un point d'un espace de fonctions d'ondes était toujours bilinéaire :

$$\mathcal{J} = \frac{h}{2\pi i} \sum \mathcal{H}_{rs} x_s p_r$$

que, par suite, l'équation de Jacobi était identique à l'équation d'ondes d'une mécanique ondulatoire de cet espace, et que la notion de trajectoire gardait son sens dans une telle mécanique ondulatoire.

A l'ensemble des mouvements possibles pour le point M correspond un ensemble de solutions de l'équation de Jacobi : chacun de ces mouvements a une certaine probabilité. Le fait de l'identité des équations d'ondes et de Jacobi suggère de transformer le problème : au lieu de considérer les divers mouvements ponctuels, on considérera une fonction d'ondes qui, par un principe analogue au principe des interférences, donnera à chaque instant la probabilité des positions des points M, c'est-à-dire la probabilité des « états ». Nous sommes sûr que cette transformation est correcte en vertu de l'identité des deux équations fondamentales. Nous obtenons ainsi une manière plus commode dans certains cas pour évaluer les probabilités des états. C'est cette transformation que nous appellerons *hyperquantification*.

2. Principes fondamentaux de l'hyperquantification. —

Pour développer ce point de vue, nous devons construire une mécanique ondulatoire de l'espace (Ψ) , et y généraliser le principe des interférences. Mais il nous faut préalablement définir ce que l'on doit entendre par probabilité de présence dans l'espace (Ψ) .

Supposons d'abord qu'à l'instant initial le point M puisse se trouver sur un ensemble dénombrable de points $\mathcal{E}_0$ avec une probabilité p_α de se trouver au α^{e} point M_α . Soit $\Psi(M)$ une fonction nulle en tout point sauf à l'origine où elle est égale à l'unité; $\Psi(M - M_\alpha)$ sera nulle partout sauf en M_α . Si nous posons :

$$\chi_0(M) = \sum_{\alpha} \sqrt{p_\alpha} \Psi(M - M_\alpha),$$

nous avons :

$$\chi_0(M_\alpha) \chi_0^*(M_\alpha) = p_\alpha$$

et $\chi_0 \chi_0^*$ nous donne les probabilités de présence à l'instant initial.

La fonction $\chi(M, t)$ obéissant à l'équation des ondes de l'espace (Ψ) , est définie en fonction de sa valeur initiale $\chi_0(M)$. Désignons par $g_1, \dots, g_s, \dots$ les coordonnées de M à l'instant initial dans un certain système de base, et par $x_1, \dots, x_s, \dots$ à un instant t dans un autre système. Si Y_{rs} est la matrice de transformations, nous avons vu plus haut, dans le cas des ondes Ω et de l'espace (Ψ) (chap. V, paragraphe 2) la propriété suivante qui s'étend à tout espace de fonctions d'ondes :

$$\chi(x_1, \dots, x_s, \dots; t) = \chi_0 \left(\sum_r Y_{1r}^*(t) x_r, \dots, \sum_r Y_{rs}^*(t) x_r, \dots \right)$$

$\chi_0(g_1, \dots, g_s, \dots)$ étant l'expression de $\chi_0(M)$ dans le premier système de base. En particulier, si les deux systèmes de base coïncident, $\chi_0(g_1, \dots, g_s, \dots)$ est la fonction $\chi(x_1, \dots, x_s, \dots; 0)$ valeur de χ à l'instant initial, et alors $Y_{rs}(0) = \delta_{rs}$.

Dans le cas particulier qui nous occupe, on a :

$$\begin{aligned} \chi(x_1 \dots x_s, \dots; t) = \\ = \sum_{\alpha} \sqrt{p(\alpha)} \, \mathcal{U} \left(\sum_r Y_{1r}^*(t) x_r - g_{1\alpha}, \dots, \sum_r Y_{sr}^*(t) x_r - g_{s\alpha}, \dots \right) \end{aligned}$$

Ainsi, les points où χ est non nul sont les points $M_{\alpha}(t)$ où les coordonnées x_r satisfont à :

$$x_{r\alpha} = \sum_s Y_{rs} g_{s\alpha}.$$

Ils se déplacent comme s'ils étaient animés du mouvement ponctuel habituel, et la probabilité qu'à l'instant t le point M soit en M_{α} est bien donnée par $\chi(M_{\alpha}, t)$ $\chi^*(M_{\alpha}, t)$ ce qui constitue une sorte de principe d'interférences.

On peut écrire

$$\chi_0(M) = \begin{cases} \sqrt{p_{\alpha}} & \text{si } M = M_{\alpha} \\ 0 & \text{si } M \neq M_{\alpha}, \end{cases} \quad M_{\alpha} \text{ appartenant à } \mathcal{E}_0$$

et en utilisant la fonction δ de Dirac :

$$\chi_0(M, t) = \int \sqrt{p(M_{\alpha})} \, \delta(M - M_{\alpha}) d\alpha$$

qui, donne $\chi_0(M, t) = \sqrt{p(M)}$ d'où une probabilité initiale de présence $\chi_0 \chi_0^*$ égale à 0 ou à p_{α} suivant le point M .

Cette forme permet de généraliser au cas d'une distribution continue sur un arc de Jordan à l'instant initial. Soit $\mathcal{E}_1$ l'ensemble des points de cet arc. Posons :

$$p(M) = \begin{cases} p(\alpha) & \text{si } M = M(\alpha) \text{ situé sur l'arc } \mathcal{E}_1 \\ 0 & \text{si } M \text{ en dehors de l'arc } \mathcal{E}_1. \end{cases}$$

$p(x)$ étant la densité de probabilité de présence sur l'arc formé par l'ensemble $\mathcal{E}_1$. On aura :

$$\chi_0(M, t) = \int \sqrt{p(M)} \delta[M - M(\alpha)] d\alpha.$$

Posons :

$$\chi_{\alpha; \Delta\alpha}(M) = \frac{1}{\sqrt{\Delta\alpha}} \int_{\alpha}^{\alpha + \Delta\alpha} \sqrt{p(M)} \delta[M - M(\alpha)] d\alpha.$$

La probabilité que M soit en un point de paramètre compris entre α et $\alpha + \Delta\alpha$ sera : $|\chi_{\alpha, \Delta\alpha}(M_{\alpha})|^2$; en effet :

$$\chi_{\alpha; \Delta\alpha}(M_{\alpha}) \cdot \chi_{\alpha; \Delta\alpha}^*(M_{\alpha}) = p(\alpha) \Delta\alpha = \chi(M_{\alpha}) \chi^*(M_{\alpha}) \Delta\alpha$$

$\chi_{\alpha; \Delta\alpha}$ joue le rôle de différentielle propre, et $\chi(M, t)$ satisfait bien ainsi au principe des interférences.

Au lieu de considérer des points M dépendant d'un seul paramètre, on peut supposer que les points éventuels dépendent de plusieurs paramètres $\alpha, \beta, \dots, \eta$, et se trouvent à l'instant initial sur une multiplicité de Jordan $\mathcal{E}_n$. On aura alors comme probabilité de présence dans un domaine $\Delta\tau = \Delta\alpha \cdot \Delta\beta \dots \Delta\eta$ l'expression $\chi_{\Delta\tau}(M, t) \chi_{\Delta\tau}^*(M, t)$ en posant :

$$\chi_{\Delta\tau}(M_{\alpha \dots \eta}, t) = \frac{1}{\sqrt{\Delta\tau}} \int_{\alpha}^{\alpha + \Delta\alpha} \dots \int_{\eta}^{\eta + \Delta\eta} \sqrt{p(M)} \delta(M - M_{\alpha \dots \eta}) d\tau$$

la fonction χ_0 étant :

$$\chi_0(M, t) = \int \dots \int \sqrt{p(M)} \delta(M - M_{\alpha, \beta \dots \eta}) d\tau$$

et $p(M)$ est égal à $p(\alpha, \beta, \dots, \eta)$ pour un point de la multiplicité $\mathcal{E}_n$ et nul en dehors de $\mathcal{E}_n$.

Un point figuratif éventuel M est caractérisé à l'instant initial par le carré des modules de ses coordonnées, les argu-

ments étant quelconques, et peuvent être pris nuls. On peut donc prendre comme paramètres $x, y, \dots, r$ les modules des n premières coordonnées initiales $g_1 \dots g_n$ du point M. La densité de probabilité de présence sera $p(g_1 \dots g_n)$ et la probabilité de présence de M à l'instant t dans un domaine $\Delta\tau = \Delta g_1 \dots \Delta g_n$ sera $\chi(M)\chi^*(M)d\tau$.

Comme $\Sigma |g_n|^2$ converge, au delà d'un certain rang $|g_n|$ sera inférieur à tout nombre donné d'avance. On voit que $p(g_1 \dots g_n)$, si n augmente indéfiniment, sera une fonction de g_n qui tendra vers la fonction de Dirac $\delta(g_n)$. On peut donc dire encore que la probabilité que ce point M soit à l'instant t dans un domaine $\Delta\tau$ est donnée par $\chi_{\Delta\tau}(M)/\chi_{\Delta\tau}^*(M)$ en posant :

$$\begin{aligned} \chi_{\Delta\tau}(M) &= \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\Delta g_1 \dots \Delta g_n}} \int_{g_1}^{g_1 + \Delta g_1} \dots \\ &\quad \dots \int_{g_n}^{g_n + \Delta g_n} \sqrt{p(g_1 \dots g_n)} \delta(M - M_{x_1 \dots x_n \dots}) d\tau_n \end{aligned}$$

et du fait que $p(g_1 \dots g_s \dots)$ peut être approchée par une fonction $p'(g_1 \dots g_n) \delta(g_{n+1}) \delta(g_{n+2}) \dots$ l'intégrale ci-dessus est approchée par une intégrale n uple.

Toute fonction χ_0 de la forme :

$$\begin{aligned} \chi_0(x_1, x_2, x_3, \dots; t) \\ = \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{p(g_1 \dots g_s \dots)} \delta(M - M_{g_1 \dots g_s}) d\tau \end{aligned} \quad (1)$$

peut être prise pour fonction d'ondes initiale.

D'autre part, en vertu du principe des probabilités totales, on doit avoir :

$$\int \dots \int_{-\infty}^{\infty} \chi \chi^* d\tau = 1 \quad (2)$$

l'intégrale étant étendue à toutes les valeurs possibles des $x_1 \dots x_s \dots$

Réciproquement, toute fonction χ_0 satisfaisant à la condition (2) donne lieu à une fonction qu'on peut mettre sous la forme (1), car on peut considérer (1) comme la limite du développement d'une fonction ψ en série de produits de fonctions de Dirac lorsque le nombre de variables augmente indéfiniment.

Le principe des interférences se généralise donc ici, en prenant pour variables d'intégration les coordonnées initiales, $g_1 \dots g_s \dots$ d'un point M, qu'on peut toujours supposer réelles.

On peut encore dire que c'est le principe de décomposition spectrale pour l'opérateur $\mathbf{G}$ produit de tous les opérateurs multiplication par g_s :

$$\mathbf{G} = g_1 g_2 \dots g_s \dots$$

Nous pouvons alors résumer cette méthode de la façon suivante :

Soit un ensemble mécanique dont l'évolution est caractérisée par un point M d'un espace (Ψ). Si à l'instant initial la position de M n'est connue qu'avec une certaine probabilité $p(M)$, c'est-à-dire si la probabilité pour que M ait des coordonnées comprises entre $g_1, g_1 + \Delta g_1$; ; $g_s,$

$$g_s + \Delta g_s ; \dots \text{ est } \int_{g_1}^{g_1 + \Delta g_1} \dots \int_{g_s}^{g_s + \Delta g_s} \dots \int_{g_k} p(g_1, g_2 \dots g_s \dots) d\tau,$$

on peut décrire les probabilités des positions de M par une fonction d'ondes χ de l'espace (Ψ), c'est-à-dire que l'évolution de l'ensemble mécanique peut être caractérisée par une mécanique ondulatoire de l'espace (Ψ). Celle-ci est définie par :

1° L'espace de configuration est l'espace (Ψ) ;

2° *Principe d'hyperquantification* : les fonctions d'ondes sont de carré sommable pour l'ensemble des variables :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int \dots \int \underbrace{\chi^* \chi}_{n} d\tau = 1;$$

3° L'opérateur hamiltonien F de l'équation d'ondes :

$$F\chi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \chi}{\partial t},$$

est :

$$F = \sum_{rs} \mathcal{H}_{rs} x_s p_r.$$

4° Le principe des interférences (ou principe de décomposition spectrale appliqué à l'opérateur G) donne les probabilités des positions du point M .

La condition 2° est un principe de quantification : elle fixe, parmi les solutions de l'équation d'ondes, celles que l'on peut adopter.

3. Comparaison avec la Superquantification. — 1° Si l'espace (Ψ) est l'espace (Ψ_N) ou l'espace (Ω) , l'hyperquantification se trouve être une troisième quantification, et correspond au cas où l'on ne connaît pas exactement les fonctions initiales de répartition ;

2° Si l'espace (Ψ) est l'espace (ψ) l'hyperquantification apparaît comme une seconde quantification. L'équation des ondes χ est alors identique à celles des ondes Ω . Mais les fonctions χ et Ω sont différentes, car elles ne satisfont pas aux mêmes conditions.

Il en résulte que, si nous considérons la superquantification et l'hyperquantification comme étant toutes deux des deuxième quantifications, les postulats qui définissent les deux mécaniques correspondantes ne diffèrent que par les conditions imposées aux fonctions d'ondes, c'est-à-dire la quantification. Nous voyons ainsi qu'il est possible de con-

struire deux mécaniques ondulatoires dans l'espace (ψ) ayant des sens physiques totalement différents, quoique ayant la même équation d'ondes: Le point fondamental qui les sépare est la manière de quantifier.

Etant donné que les fonctions d'ondes doivent toujours pouvoir être considérées comme des éléments d'un certain espace de Hilbert, on voit que la quantification revient, en somme, à choisir l'espace de Hilbert auquel appartiendront les fonctions devant intervenir dans la théorie.

Aussi faut-il bien distinguer les deux notions suivantes :

1° Celle d'*ondulisation* qui consiste à passer d'une mécanique ponctuelle à une mécanique ondulatoire. Le principe d'ondulisation permet d'écrire l'équation d'ondes qui servira de base à cette mécanique ondulatoire ;

2° Celle de *quantification* qui consiste à indiquer les conditions qu'on impose aux fonctions d'ondes et qui, par conséquent définit l'espace fonctionnel auquel appartiendront les fonctions propres des opérateurs et les fonctions d'ondes. Une fois établies l'équation d'ondes et les propriétés des fonctions d'ondes, il ne reste plus qu'à définir des opérateurs et à leur attribuer un sens physique pour que la mécanique ondulatoire ainsi construite soit complètement déterminée du point de vue physique.

Les exemples de la superquantification et de l'hyperquantification nous montrent que, conduit à la même équation d'ondes par le principe d'ondulisation, il nous est possible de construire dans un même espace deux mécaniques ondulatoires différentes par le choix de deux quantifications différentes.

4. **Théorie de la valence de Heitler.** — Heitler ⁽³⁰⁾, au cours de ses développements de la théorie quantique de la valence chimique, a été amené récemment à considérer un espace (n_i) analogue à l'espace (n), mais à un nombre fini de dimensions, dans lequel les coordonnées n_i sont égales au nombre de traits de valence entre deux atomes.

Il a trouvé que les fonctions d'ondes caractérisant le système formé par l'ensemble des atomes de la molécule considérée pouvaient être mises en correspondance avec les fonctions d'ondes de l'espace (n_1). Remontant de là à la mécanique ponctuelle de cet espace, il a pu en tirer de nombreuses conclusions pour les molécules complexes qui ne pouvaient être traitées par un calcul rigoureux. Nous avons encore là un exemple du secours que peuvent rendre les mécaniques ponctuelles ou ondulatoires dans des espaces abstraits.

5. Théorie quantique des champs. — C'est encore la même méthode d'utiliser les principes d'ondulisation et de quantification qu'on a cherché à employer pour bâtir une théorie de l'électromagnétisme en accord avec la théorie des quanta. Mais cette théorie, élaborée par Heisenberg et Pauli ⁽³²⁾, n'a pas conduit à des résultats satisfaisants au point de vue physique, c'est pourquoi nous nous bornons à la signaler.

La méthode utilisée a été de faire apparaître des équations canoniques entre des grandeurs caractérisant le champ. On a englobé dans le système considéré, à côté des points matériels chargés électriquement, le champ de rayonnement qui transmet les actions que ces points exercent les uns sur les autres. Pour ce système total il existe une fonction de Lagrange et par suite un schéma canonique. Dans un tel schéma la partie matérielle du système n'est pas décrite par les variables corpusculaires, mais par les variables ψ décrivant le champ matériel. On obtient ainsi un système à une infinité continue de degrés de liberté. Pour passer à la théorie quantique correspondante, on remplace les variables de champ et leurs moments conjugués par des opérateurs suivant la méthode habituelle. Les fonctions d'ondes définissant les amplitudes de probabilité deviendront des fonctionnelles des variables de champ.

Gr. C. Moïsil ⁽³³⁾ a montré ensuite qu'on pouvait, dans

l'espace fonctionnel des variables de champ, associer une propagation d'ondes au sens de l'optique géométrique au mouvement du point figuratif et que, pour passer à la théorie quantique, il suffisait de faire le passage à la mécanique ondulatoire par la méthode de Louis de Broglie.

Nous ne développerons pas cette théorie qui se heurte à de graves difficultés, et que l'on trouvera exposée notamment dans les travaux de Rosenfeld ⁽³⁴⁾ et de Solomon ⁽³⁴⁾.

D'après des idées récentes de Fock, la théorie quantique des champs est la seule qui soit possible en tenant compte du principe de correspondance. Pour construire une théorie satisfaisante, il estime qu'il est nécessaire d'abandonner le principe de correspondance et qu'il faut que la théorie quantique de l'électromagnétisme soit constituée sur des bases nouvelles.

6. Théorie des photons de Louis de Broglie. — C'est une telle tentative que Louis de Broglie ⁽³¹⁾ poursuit actuellement. Il part de la notion de photon en lui attribuant certaines propriétés obtenues comme limites des propriétés d'un électron de Dirac dont la masse et la charge tendraient simultanément vers zéro. Il estime en effet, et ce fut là une des idées qui l'ont guidé pour l'élaboration de la mécanique ondulatoire, que le photon et l'électron doivent être traités d'une façon analogue : par exemple, un phénomène comme l'effet Compton doit être traité comme le choc de deux corpuscules. Dans cette nouvelle théorie de la lumière, ce sont encore les principes d'ondulisation et de quantification qui jouent un rôle essentiel.

Louis de Broglie cherche donc à construire sa théorie dans le cadre d'une mécanique ondulatoire où électrons et photons seront considérés de la même manière, comme des corpuscules.

Dans un phénomène de choc d'un photon et d'un corpuscule, on devra vraisemblablement prendre comme espace de

configuration un espace à six dimensions, et comme espace des fonctions d'ondes l'espace (ψ_8) .

Citons enfin la tentative de théorie du noyau de Heisenberg ⁽³⁵⁾ qui, elle aussi, rentre dans le cadre des mécaniques abstraites.

Ainsi, depuis la première mécanique ondulatoire, toutes les nouvelles théories qui ont été tentées jusqu'à présent sont calquées sur un formalisme analogue. On peut penser qu'actuellement et dans le proche avenir, c'est encore sur les bases d'une mécanique ondulatoire dans un certain espace qu'il faudra chercher à construire les théories devant s'appliquer aux phénomènes n'ayant pas reçu jusqu'ici d'explications satisfaisantes.

CONCLUSIONS GÉNÉRALES

Maintenant que nous venons de passer en revue les diverses théories quantiques que nous avons examinées séparément et successivement en y apportant notre contribution personnelle, il nous faut en tirer les conclusions générales qui constituent le but de cette étude.

Comme nous l'avons retracé rapidement au début, la mécanique ondulatoire s'est présentée d'abord comme une extension de l'ancienne mécanique. Mais au fur et à mesure de ses progrès elle s'en est détachée progressivement pour former une théorie indépendante, la mécanique classique n'apparaissant plus que comme une approximation analogue à celle de l'optique géométrique, s'appuyant sur des méthodes nouvelles et conduisant à des résultats physiques des plus curieux dont le plus important a été l'abandon d'un déterminisme rigoureux des phénomènes physiques.

De cette première mécanique ondulatoire ont surgi ensuite diverses autres de plus en plus éloignées des méthodes classiques : laissant de côté les développements et les applications de chacune d'elles, nous nous sommes attaché à leurs principes.

Cette étude nous montre combien nous sommes loin du point de vue classique où l'on expliquait les phénomènes physiques de deux manières distinctes et opposées suivant les phénomènes : soit par des théories mécaniques où l'on considérait des points ou des systèmes de points en mouvement, soit par des ondes qui se propageaient dans l'espace physique et possédaient une réalité. Il ne semblait exister aucune connexion entre ces deux catégories de théories.

Pourtant les phénomènes quantiques amenèrent à associer des mouvements ponctuels à des mouvements ondulatoires. Cette connexion a été établie par Louis de Broglie lors de sa première Mécanique Ondulatoire : au point de vue physique elle semble ramener les théories à un modèle unique.

Par cette mécanique ondulatoire a été trouvée une nouvelle manière d'expliquer les phénomènes physiques, un nouveau schéma logique que nous avons voulu examiner en détail.

C'est à l'étude de la Mécanique Ondulatoire simple qu'a été consacré le début de notre travail. Partant de l'idée de base de Louis de Broglie, nous avons retracé les étapes de son évolution, rappelé le rôle de l'espace de configuration et le sens de la quantification. Nous avons montré comment s'introduisent les divers opérateurs, la part qu'ils ont prise dans la genèse des principes généraux, les propriétés qu'ils possèdent, et en avons donné une classification. Puis nous avons précisé l'espace des fonctions d'ondes qu'il fallait adopter, à savoir l'espace entier des fonctions de carré sommable, et non pas un sous-ensemble de cet espace, par conséquent un espace de Hilbert. Cela fait, nous avons été en mesure d'énoncer les concepts et postulats de la Mécanique Ondulatoire simple sous une forme qui nous semble logiquement convenir et qui nous a servi de modèle pour toutes les autres théories.

Passant à l'étude de la Mécanique de Pauli qui a introduit la notion de « spin », nous avons montré qu'il ne fallait pas considérer une quatrième variable, dite « variable de spin » pour caractériser un corpuscule, d'où cette conséquence que l'espace de configuration à adopter pour un seul corpuscule est l'espace euclidien à trois dimensions, et que l'espace des fonctions d'ondes qui convient est l'espace des vecteurs à deux composantes dont chacune est une fonction de carré sommable. Cet espace, que nous avons désigné par (ψ_2) est un espace de Hilbert. Pour les énoncés des concepts et postu-

lats nous avons adopté la forme se rapprochant le plus de celle de la mécanique ondulatoire simple.

Abordant ensuite l'étude de la mécanique de Dirac, nous avons, de même que pour la mécanique de Pauli, montré que la notion de variable de spin était inadéquate, que comme espace des fonctions d'ondes il convenait d'adopter l'espace (ψ_i) des vecteurs à quatre composantes dont chacune est une fonction de carré sommable : c'est un espace de Hilbert. Ces fonctions d'ondes ψ de l'espace (ψ_i) peuvent être considérées comme des fonctions de point de l'espace temps, ou comme définissant des ondes se propageant dans une multiplicité à trois dimensions extraite de l'espace-temps. Puis nous nous sommes appliqué à rapprocher cette mécanique, d'une part de la théorie de la relativité restreinte, d'autre part de la mécanique ondulatoire simple. Nous en avons alors énoncé les concepts et postulats en les rapprochant de ces points de vue. Il en ressort cette constatation que ceux liés au formalisme de la théorie se mettent parfaitement sous forme relativiste, tandis que ceux liés au sens des symboles ne s'y adaptent qu'imparfaitement. Au contraire, tous peuvent être mis sous une forme très voisine de celle de la Mécanique Ondulatoire Simple.

Dans la seconde partie de notre travail consacrée aux autres théories quantiques et principalement à la Superquantification, nous nous sommes trouvé devant un champ beaucoup moins exploré qu'au cours de la première partie portant sur des Mécaniques Ondulatoires à peu près constituées maintenant. Aussi, nos recherches personnelles ont-elles pu s'y exercer plus librement.

D'abord, nous appuyant sur les théorèmes de Dirac-Fock que nous avons mis sous une forme générale, nous avons montré que toute Mécanique Ondulatoire était équivalente à une mécanique ponctuelle de l'espace des fonctions d'ondes, — mécanique ponctuelle que nous avons pu faire dériver d'un principe d'Hamilton. L'espace des fonctions d'ondes

étant un espace de Hilbert, nous avons été ainsi amené à l'idée de mécaniques dans des espaces abstraits. Puis, partant de ces résultats, nous avons développé sous une forme rigoureuse la théorie de la superquantification, dont on n'avait envisagé jusqu'ici que les applications sans qu'aucun effort n'eût été encore tenté quant à ses principes. Nous y sommes parvenu d'abord en suivant la méthode de Dirac qui utilise un espace (n) dont nous avons précisé la nature et étudié les propriétés. De même, avons-nous étudié les propriétés des mécaniques ponctuelle et ondulatoire de cet espace, après quoi nous avons précisé la nature de l'espace (Ψ_N) des fonctions d'ondes. En prenant pour cadre formel la mécanique ondulatoire (n) , nous avons alors énoncé les concepts et postulats de la superquantification, tout en soulignant certaines objections que cette méthode soulève, en particulier la non-justification du passage de la mécanique ponctuelle (n) à la mécanique ondulatoire (n) .

Pour éviter ces objections, il fallait faire choix d'une autre méthode dont le développement fût véritablement rigoureux. Nous estimons l'avoir trouvée en poursuivant une voie dont Fock, voilà quelques années, avait posé les premiers jalons, mais sans s'y appesantir. Pour cela, nous sommes parti à nouveau de la Mécanique ponctuelle de l'espace (ψ) des fonctions d'ondes d'une des Mécaniques ondulatoires usuelles. Nous avons montré que la superquantification pouvait être édifiée sur les bases d'une Mécanique ondulatoire de l'espace (ψ) , que c'était là la voie logique pour y parvenir, et que cette théorie était valable du fait de l'identité de l'équation de Jacobi et de l'équation d'ondes. Le principe de superquantification revient alors à faire une sélection parmi les mouvements possibles de l'espace (ψ) . Dans ces conditions, après avoir précisé les propriétés de l'espace (Ω) des fonctions d'ondes, nous avons pu énoncer les postulats de la superquantification en nous appuyant sur la Mécanique ondulatoire (ψ) .

Il restait à établir l'équivalence des deux méthodes pour parvenir à la superquantification. Pour démontrer cette équivalence, nous avons eu à considérer les mécaniques ponctuelles des deux espaces de fonctions d'ondes utilisés : (Ψ_N) et (Ω) , mais surtout, — et c'est là une des particularités intéressantes de notre raisonnement, — nous avons été conduit à introduire une nouvelle sorte de mécaniques ondulatoires : celle de second type associées à une mécanique ponctuelle selon un nouveau mode. Nous avons reconnu que la mécanique ondulatoire (n) était justement une mécanique de second type associée à la mécanique ponctuelle (Ω) , ce qui justifie alors la réussite de la méthode de Dirac.

Dans un dernier chapitre, nous avons rapidement envisagé les autres théories quantiques pour montrer qu'elles faisaient également appel à des mécaniques dans des espaces abstraits : nous avons d'abord parlé d'une méthode que nous proposons pour étudier les problèmes où la fonction d'ondes n'est pas connue exactement, et que nous avons appelée hyperquantification, puis nous avons mentionné la théorie de la valence de Heitler, la théorie quantique des champs, et la nouvelle théorie des photons de Louis de Broglie.

En somme, nous avons eu pour premiers buts d'étudier les principes des trois Mécaniques Ondulatoires et de fonder sur des bases solides la théorie de la superquantification.

Mais il est un autre objectif que nous avons en vue, et qui consiste à retirer de la comparaison des diverses théories quantiques rencontrées au cours de notre étude des idées générales susceptibles d'en faire apparaître un nouvel aspect.

Les diverses mécaniques plus ou moins abstraites qu'utilisent ces théories possèdent toutes de nombreuses analogies et des propriétés communes. D'une part, les mécaniques ponctuelles sont toutes caractérisées par des équations canoniques et on peut les faire dériver d'un principe d'Hamilton. D'autre part, les diverses mécaniques ondulatoires sont

toutes coulées sur le même moule et leurs concepts, postulats et définitions se divisent en trois classes : ceux qui sont communs à toutes, ceux qui servent à les particulariser, enfin ceux qui donnent un sens physique à la mécanique. Pour bien préciser ces analogies, nous avons toujours donné dans nos énoncés le même numéro d'ordre aux postulats correspondants. Par exemple, le postulat 1 définit l'espace dans lequel se propagent les ondes ψ qu'on peut appeler d'une façon générale *espace configuratif*; le postulat 2, qui associe à toute grandeur physique un opérateur, est commun à toutes les mécaniques ondulatoires; le postulat 3, qui énonce les conditions imposées aux fonctions propres des opérateurs mécaniques, définit l'espace des fonctions d'ondes. Le postulat 4 spécifie les conditions imposées aux opérateurs mécaniques : la condition *a*) exprime qu'ils appartiennent à l'espace des fonctions d'ondes, les deux autres *b*) et *c*) sont identiques pour toutes les mécaniques ondulatoires, de même que les postulats 5, 6, 7. Enfin, le postulat 8 fixe la forme de l'hamiltonien. Les définitions qui le suivent sont en partie communes à toutes les mécaniques et indiquent les opérateurs utilisés.

On voit qu'une mécanique opératoire est, en somme, caractérisée par : 1° l'espace de configuration, 2° l'hamiltonien, 3° l'espace des fonctions d'ondes.

Le premier principe de quantification ou postulat 4 constitue un principe de restriction : il indique, en somme, que seules les fonctions appartenant à l'espace choisi comme espace des fonctions d'ondes sont à considérer. Bien que les espaces de configuration soient très divers : espace (R_3) ou espace euclidien à trois dimensions, espace (R_{3N}) , espace (n) , espace (ψ) , etc., ils possèdent tous certaines propriétés communes, parmi lesquelles celles d'être des espaces distancés, séparables, vectoriels, complets.

Quant aux espaces de fonctions d'ondes, ils sont tous très voisins, étant des espaces de Hilbert.

Ainsi, nous voyons apparaître pour l'étude des théories quantiques, l'utilité d'employer dans divers espaces des mécaniques abstraites, tant ponctuelles qu'ondulatoires, toutes calquées sur le même modèle.

Une question importante est d'étudier les connexions qui existent entre ces mécaniques. Elles sont très diverses : d'abord deux mécaniques ponctuelles ou ondulatoires dans des espaces à un même nombre de dimensions peuvent se correspondre par une transformation de contact, comme c'est le cas pour les mécaniques (n) et (ψ) .

Ensuite, on peut passer d'une mécanique ponctuelle à une mécanique ondulatoire d'un même espace par « ondulisation » et « quantification ». L'ondulisation consiste à remplacer les coordonnées x_i et les composantes de la quantité de mouvement p_i par des opérateurs $x_i \cdot$ et $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_i}$ et à porter ces opérateurs dans une fonction soit égale, soit équivalente à la fonction hamiltonienne pour obtenir l'opérateur $\mathbf{H}$ de l'équation d'ondes.

La quantification consiste à fixer les conditions qu'en imposera aux solutions de l'équation d'ondes : elle détermine l'espace des fonctions d'ondes. Partant du même espace de configuration et de la même équation d'ondes, on peut construire deux mécaniques ondulatoires différentes, comme nous l'avons vu pour la superquantification et l'hyperquantification.

Puis une mécanique ondulatoire est équivalente à une mécanique ponctuelle de l'espace des fonctions d'ondes en vertu des théorèmes de Dirac-Fock généralisés, ce qui fournit une autre connexion entre mécaniques ponctuelles et ondulatoires.

Enfin, une mécanique ondulatoire de second type peut être associée d'une autre façon que par l'ondulisation à une mécanique ponctuelle.

De tous les résultats que nous avons obtenus, celui que

nous considérons comme l'un des plus importants, c'est que les théories qu'antiques utilisent dans divers espaces abstraits des mécaniques ponctuelles et ondulatoires qui, dans une même théorie, se trouvent reliées entre elles selon l'un des quatre modes ci-dessus décrits.

Ainsi, nous étendons la notion de « mécanique » d'une façon abstraite à divers espaces, comme auparavant, grâce aux travaux de M. Fréchet, la notion « d'espace », s'était étendue. L'emploi de ces mécaniques abstraites doit offrir pour le physicien des quanta la même aide qu'apportent à l'analyste les espaces abstraits.

Les analogies que nous avons fait ressortir entre les différentes mécaniques font naître à l'esprit une autre idée : celle d'englober toutes les mécaniques ponctuelles dans une « Mécanique ponctuelle générale », toutes les mécaniques ondulatoires dans une « Mécanique ondulatoire générale », à l'exemple des espaces abstraits englobant divers espaces utilisés en analyse, à l'exemple aussi de l'analyse générale qu'a édifiée M. Fréchet.

A cette suggestion nous pouvons répondre par l'affirmative, à tel point que nous avons consacré notre seconde thèse à énoncer les concepts et postulats de cette Mécanique générale.

Le présent travail peut donc être considéré comme une introduction à la *Mécanique générale*, et c'est là le but principal que nous nous étions proposé : constituer les bases sur lesquelles elle pourra être édifiée. D'ores et déjà, on peut prévoir qu'elle devra se diviser en trois parties : Mécanique ponctuelle, Mécanique ondulatoire, Connexions entre les diverses mécaniques.

Dans l'état actuel des choses, il nous semble que la méthode à suivre pour construire une nouvelle théorie physique doit être de s'appuyer sur une mécanique abstraite, ponctuelle ou ondulatoire, et de rentrer dans le cadre de la mécanique générale. En effet, jusqu'à maintenant un phéno-

mène physique a toujours été associé à un mouvement ponctuel, ou à une propagation d'ondes, plus ou moins généralisé et plus ou moins abstrait. Or, la mécanique générale apprendra justement à relier de différentes manières les ondes et les points figuratifs.

En définitive, nous pensons, par notre travail, avoir contribué à montrer sous un certain angle la profondeur de la révolution qui s'est produite en physique au cours de ces dernières années : alors qu'autrefois les théories classiques se ramenaient à deux cadres logiques, mécanique et ondes physiques, les théories quantiques nouvelles, outre les profonds changements qu'elles ont amenés dans nos conceptions physiques, sont venues s'appuyer sur un cadre logique beaucoup plus général : celui des mécaniques abstraites, dans lequel rentre l'ancien cadre classique, mais pour une très petite part.

Ainsi, l'œuvre de Louis de Broglie n'a pas été seulement le point de départ d'une nouvelle mécanique ayant bouleversé les idées classiquement admises sur le monde physique, mais elle a été aussi la source de toute une manière nouvelle de raisonnement dans la physique mathématique. C'est elle qui nous a conduit à montrer qu'il y avait une grande diversité de mécaniques ponctuelles et ondulatoires, de même qu'il y a un grand nombre de géométries. Désormais, mécanique et géométrie se placent sur le même plan abstrait. Enfin, elle nous a permis d'entrevoir une mécanique générale qui englobera toutes les mécaniques.

Ces acquisitions ne peuvent qu'accentuer encore les immenses progrès déjà accomplis dans la logique et le formalisme des théories physiques.

BIBLIOGRAPHIE

1. HADAMARD. — Préface de l'édition française de l'ouvrage de G. BIRTWISTLE. *La Nouvelle Mécanique des Quanta* (A. Blanchard, 1929).
2. LOUIS DE BROGLIE. — *Introduction à la Mécanique Ondulatoire* (Hermann, 1930); *La Quantification dans la Nouvelle Mécanique* (Hermann, 1932).
3. SCHRÖDINGER. — *Abhandlungen zur Wellenmechanik* (J. A. Barth, Leipzig, 1928). Traduction française, AL. PROCA (Alcan, 1933).
4. JOHANN VON NEUMANN. — *Göttinger Nachrichten* (1927), pp. 14-18; *Math. Annalen*, **102** (1929), pp. 64-66. — *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* (Springer, 1932).
5. M. H. STONE. — *Lineary Transformations in Hilbert Space* (*American Math. Soc. Colloquium publications*, vol. XV, 1932), pp. 2-4.
6. M. H. STONE. — *Ib.*, pp. 185-195 et J. v. NEUMANN. *Math. Ann.*, **102** (1929).
7. M. H. STONE. — *Ib.*, p. 87, 123. J. v. NEUMANN. *Journ. f. Math.* **161** (1929), pp. 208-236.
8. PAULI. — *Zeits. f. Phys.*, B. **43** (1927), p. 601.
9. M. H. STONE. — *Loc. cit.*, pp. 29-32.
10. M. H. STONE. — *Ib.*, p. 111.
11. P. A. M. DIRAC. — *The principles of Quantum Mechanics* (Oxford, 1930), traduction française, PROCA et ULLMO (Conf. Rapports. Presses Universitaires), p. 279; voir aussi : LOUIS DE BROGLIE *La théorie de l'électron magnétique de Dirac* (Hermann, 1933); AL. PROCA. *Thèse Paris*, 1933.
12. VAN DER WAERDEN. — *Gott. Nachrichten* (1929), p. 100. *Die Gruppentheoretische methode in der quantenmechanik* (Springer, 1932), p. 81; voir aussi : LAPORTE et UHLENBECK. *Phys. Rev.*, **37** (1931), p. 1380; SOLOMON *Journ. de Phys.*, **2**, série VIII, (1931), p. 321.
13. LOUIS DE BROGLIE. — *Comptes Rendus*, **194** (1932), p. 1062; **195** (1932), p. 577.
14. JEAN PERRIN. — *Les Eléments de la Physique*.
15. EINSTEIN. — *Sur l'électrodynamique des corps en mouvement*. traduction SOLAVINE (Gauthier-Villars, 1925); *Ann. der Phys.*, t. XVII (1905).

16. FOCK. — *Zeits. f. Phys.*, B **49** (1928), p. 339.
17. P. A. M. DIRAC. *Proc. Roy. Soc.*, A **114** (1927), p. 243.
18. HEISENBERG. — *Zeits. f. Phys.* (1929).
19. LANDÉ. — *Zeits. f. Phys.*, **74** (1932), p. 780.
20. P. JORDAN. — *Zeits. f. Phys.*, **44** (1927), p. 473, **45** (1927), p. 766, **75** (1932), p. 648; P. JORDAN et O. KLEIN. *Zeits. f. Phys.*, **45** (1927), p. 751.
21. FOCK — *Zeits. f. Phys.*, **75** (1932), p. 622.
22. JEAN-LOUIS DESTOUCHES. — *Comptes Rendus*, juillet 1933.
23. JEAN LOUIS DESTOUCHES. — *Comptes Rendus*, **195** (1932), p. 1374.
24. M. FRÉCHET. — *Les Espaces Abstraits* (Gauthier-Villars, 1928), p. 81.
25. M. FRÉCHET. — *Ib.* p. 86; *Sur une définition du nombre de dimensions* (Rev. Ac. Ciencias, Madrid, 1928).
26. M. FRÉCHET. — *Les Espaces Abstraits*, p. 143; *Les Espaces Vectoriels Abstraits* (Bull. Calcutta. Math. Soc., vol. **16** (1926), pp 51-62).
27. JEAN-LOUIS DESTOUCHES. — *Comptes Rendus*, **193** (1931), p. 518, **194** (1932), p. 589.
28. JORDAN et WIGNER. — *Zeits. f. Phys.*, **47** (1928), p. 631.
29. JEAN-LOUIS DESTOUCHES. — *Comptes Rendus*, **196** (1933), p. 529.
30. HEITLER. — *Zeits. f. Phys.*, **79** (1932), p. 143.
31. LOUIS DE BROGLIE. — *Comptes Rendus*, **195** (1932), pp. 536, 577.
32. HEISENBERG et PAULI — *Zeits. f. Phys.*, **56** (1929), p. 1; **59** (1930), p. 168.
33. GR. G. MOISIL. — *Comptes Rendus*, **192** (1931), p. 149.
34. ROSENFELD et SOLOMON. — *Journ de Phys.*, **2** (1931), p. 139. *Naturwiss* (1931), p. 376; J. SOLOMON. *Thèse Paris*, 1931.
35. HEISENBERG. — *Zeits. f. Phys.*, B. **80**, p. 587.

DEUXIÈME THÈSE

PROPOSITIONS DONNÉES PAR LA FACULTÉ

Les principes de la mécanique générale.

VU ET APPROUVÉ :

Paris, le 6 mai 1933.

Le Doyen de la Faculté des Sciences,

CH. MAURAIN.

VU ET PERMIS D'IMPRIMER :

Paris, le 23 mai 1933.

Le Recteur de l'Académie de Paris,

S. CHARLÉTY.

